

TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI  
FAKULTA STROJNÍ  
KATEDRA MATERIÁLU

Studijní program: M2301 Strojní inženýrství  
Studijní obor: 2303 T 002 Strojírenská technologie  
Zaměření: Materiálové inženýrství

**Simulace průběhu cementace s pomocí programu TT Steel**

**Simulation of carburizing with software TT Steel**

**KMT – 272**

**Roman Helma**

Vedoucí práce: doc. Ing. Karel Daďourek, CSc.

Počet stran: 59  
Počet tabulek: 6  
Počet obrázků: 14  
Počet grafů: 8  
Počet příloh: 7 + přiložené CD

Datum 17.5.2011



## **ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE**

Jméno a příjmení	<b>Roman H E L M A</b>
studijní program	<b>M2301 Strojní inženýrství</b>
obor	<b>2303 T 002 Strojírenská technologie</b>
zaměření	<b>Materiálové inženýrství</b>

Ve smyslu zákona č. 111/1998 Sb. o vysokých školách se Vám určuje diplomová práce na téma

### **Simulace průběhu cementace s pomocí programu TT Steel**

#### **Zásady pro vypracování:**

(uved'te hlavní cíle diplomové práce a doporučené metody pro vypracování)

- 1) Seznamte se s možnostmi užití programu TT Steel k simulaci procesů tepelného zpracování.
- 2) Vypracujte metodiku rozšíření tohoto programu pro simulaci procesu chemicko-tepelného zpracování.
- 3) Pro cementační ocel TL 4521 a předepsaný průběh cementace vypočtete průběh koncentrace uhlíku v oceli po cementaci.
- 4) S pomocí programu TT Steel určete fázové složení a průběh tvrdosti cementovaného válcového tělesa.
- 5) Průběh tvrdosti porovnejte s experimentálně zjištěným průběhem z předchozí diplomové práce.
- 6) Zhodnot'te dosažené výsledky

Forma zpracování diplomové práce:

průvodní zpráva v rozsahu 40- 50 stran

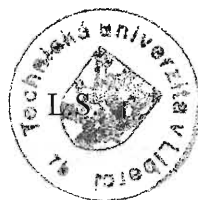
- přílohy

Seznam literatury (uved'te doporučenou odbornou literaturu):

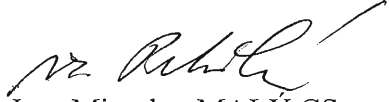
- [1] Program TT Steel 2.1, uživatelská příručka.
- [2] Totten, G.E. Steel Heat Treatment, Taylor and Francis, New York, 2007
- [3] Vilčínská, L. Studium vlivů procesů tepelného zpracování na deformaci, DP, TU v Liberci 2010

Vedoucí diplomové práce  
Konzultant diplomové práce.

doc. Ing. Karel Daďourek, CSc.



  
prof. Ing. Petr LOUDA, CSc.  
vedoucí katedry

  
doc. Ing. Miroslav MALÝ, CSc.  
děkan

V Liberci dne 02.03 2011

---

Platnost zadání diplomové práce je 15 měsíců od výše uvedeného data (v uvedené lhůtě je třeba podat přihlášku ke SZZ)  
Termíny odevzdání diplomové práce jsou určeny pro každý studijní rok a jsou uvedeny v harmonogramu výuky

## **Anotace**

Tato diplomová práce se zabývá simulací procesu cementace s následným kalením. Simulace sestává ze dvou hlavních částí, kde první část simuluje rozložení uhlíku po cementaci v aktivním plynném prostředí. Ve druhé části jsou pomocí zvoleného programu získány mechanické charakteristiky a fázové složení zakalené oceli.

## **Annotation**

This thesis deals with the simulation of carburizing with subsequent quenching. The simulation consists of two main parts. The first part simulates carburizing in the active gas. In the second part is used a selected program for findings mechanical characteristics and phase composition of hardened steel.

## **Klíčová slova**

TTSteel, cementace, difuze, simulace, kalení

## **Keywords**

TTSteel, carburizing, diffusion, simulation, quenching

## **Prohlášení**

Byl jsem seznámen s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé diplomové práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li diplomovou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Diplomovou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

Datum 17.5. 2011

Podpis

## **Poděkování**

Velmi rád bych na tomto místě poděkoval doc. Ing. Karlu Daďourkovi, CSc. za jeho odborné rady a trpělivé vedení mé diplomové práce.

# OBSAH

<b>1. ÚVOD.....</b>	<b>7</b>
<b>2. TEORETICKÁ ČÁST.....</b>	<b>8</b>
2.1 DIFUZE A JEJÍ VÝZNAM V TECHNICKÉ PRAXI .....	8
2.2 FYZIKÁLNÍ (ATOMOVÝ) PŘÍSTUP .....	8
2.2.1 <i>Mechanismy difuze</i> .....	9
2.2.2 <i>Frekvence přeskoků atomů</i> .....	10
2.2.3 <i>Působení hybné síly na frekvenci přeskoků</i> .....	10
2.2.4 <i>Střední kvadratické přemístění atomů</i> .....	12
2.2.5 <i>Jednorozměrný difuzní tok</i> .....	13
2.3 FENOMENOLOGICKÝ PŘÍSTUP .....	14
2.3.1 <i>Obecné pojetí</i> .....	14
2.3.2 <i>Fickovy zákony</i> .....	14
2.3.3 <i>Kvazistacionární model difuze</i> .....	17
2.4 ROVNOVÁŽNÉ POMĚRY V SYTÍCÍ ATMOSFÉRE.....	19
2.5 METODA KONEČNÝCH DIFERENCÍ.....	23
2.6 SOFTWARE TTSTEEL .....	25
2.6.1 <i>Rozsah použitelnosti z hlediska chemického složení</i> .....	25
2.6.2 <i>Hybridní rozpadový diagram</i> .....	25
2.6.3 <i>Získání ochlazovacích křivek</i> .....	26
2.6.4 <i>Rozložení teplot, fází a mechanických vlastností v tělese</i> .....	28
<b>3. EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST.....</b>	<b>29</b>
3.1 MATERIÁL A JEHO CHEMICKO-TEPELNÉ ZPRACOVÁNÍ .....	29
3.2 ROZLOŽENÍ UHLÍKU PO CEMENTACI.....	32
3.2.1 <i>Vstupní parametry použité při výpočtu</i> .....	32
3.2.2 <i>Stanovení aktivity v základním materiálu</i> .....	34
3.2.3 <i>Vliv jednotlivých přísad na aktivitu uhlíku</i> .....	39
3.2.4 <i>Stanovení difuzivity</i> .....	40
3.2.5 <i>Profil uhlíkové aktivity během difuze</i> .....	41
3.2.6 <i>Konečný koncentrační profil uhlíku</i> .....	48

3.3	URČENÍ MECHANICKÝCH HODNOT A FÁZOVÉHO SLOŽENÍ .....	49
3.3.1	<i>Definování parametrů chladicího média .....</i>	<i>50</i>
3.3.2	<i>Simulace ochlazování .....</i>	<i>51</i>
3.3.3	<i>Zhodnocení experimentu.....</i>	<i>53</i>
4.	<b>ZÁVĚR .....</b>	<b>54</b>
	<b>SEZNAM POUŽITÝCH ZDROJŮ.....</b>	<b>55</b>
	<b>SEZNAM TABULEK.....</b>	<b>56</b>
	<b>SEZNAM OBRÁZKŮ .....</b>	<b>57</b>
	<b>SEZNAM GRAFŮ .....</b>	<b>58</b>
	<b>SEZNAM PŘÍLOH.....</b>	<b>59</b>



# 1. ÚVOD

Současný výkon výpočetní techniky ve spojení s nepřeberným množstvím programových aplikací nabízí dostupnou numerickou simulaci takřka všech běžně užívaných technologických procesů strojírenské výroby.

Počítačová simulace je oproti reálným zkouškám a experimentům ve většině případů levnějším a také výrazně rychlejším prostředkem získání věrného popisu skutečnosti, jenž vede k návrhu či optimalizaci technologického řešení.

Jedním z těchto simulačních programů zakoupených Technickou univerzitou je produkt ostravské firmy ITA spol. s.r.o. TTSteel 2.1. Tento program je primárně určen k výpočtům mechanických vlastností ocelí po jejich tepelném zpracování.

Předkládaná diplomová práce si však klade za cíl aplikovat tento program v oblasti zpracování chemicko-tepelného, tedy tepelného zpracování ocelí s měnění se koncentrací uhlíku v podpovrchové vrstvě.

Hlavním předmětem této práce je tedy vypracování metodiky, již lze tuto aplikaci provést a zjištění jakých výsledků lze takovouto simulací dosáhnout.

## 2. TEORETICKÁ ČÁST

V této části jsou teoretické předpoklady řazeny chronologicky tak, jak byly následně použity k simulaci v experimentální části.

Nejdříve jsou objasněny současné přístupy k problematice difuze v tuhém prostředí a jejich možném matematickém popisu v procesu sycení oceli uhlíkem.

Poté jsou načrtnuty možnosti simulace tepelného zpracování za pomoci programu TTSteel 2.1.

### 2.1 Difuze a její význam v technické praxi

Difuzi lze charakterizovat jako přenosový jev, při němž dochází k relativnímu pohybu částic hmoty vzhledem ke svému hmotnému okolí.

Difuze je vedle proudění a mechanického míchání dalším možným mechanismem přenosu hmoty v plynném a kapalném skupenství, avšak jediným možným ve skupenství pevném. Jedná se tedy o jediný mechanismus sloužící k dosažení změny chemického složení, bez předchozí změny látkového skupenství.

Difuzní pochody hrají důležitou úlohu v řadě technických aplikací. Schopnost materiálu difundovat do svého okolí se využívá například při spojování kovů svařováním a plátováním či slinování práškových materiálů. Difuze je mimo jiné řídicím členem tečení materiálu za studena a všech tepelně aktivovaných fázových přeměn.

K problematice difuze lze přistupovat buď pomocí přístupu *Fenomenologického*, nebo pomocí *Fyzikálního (Atomového)*.

### 2.2 Fyzikální (Atomový) přístup

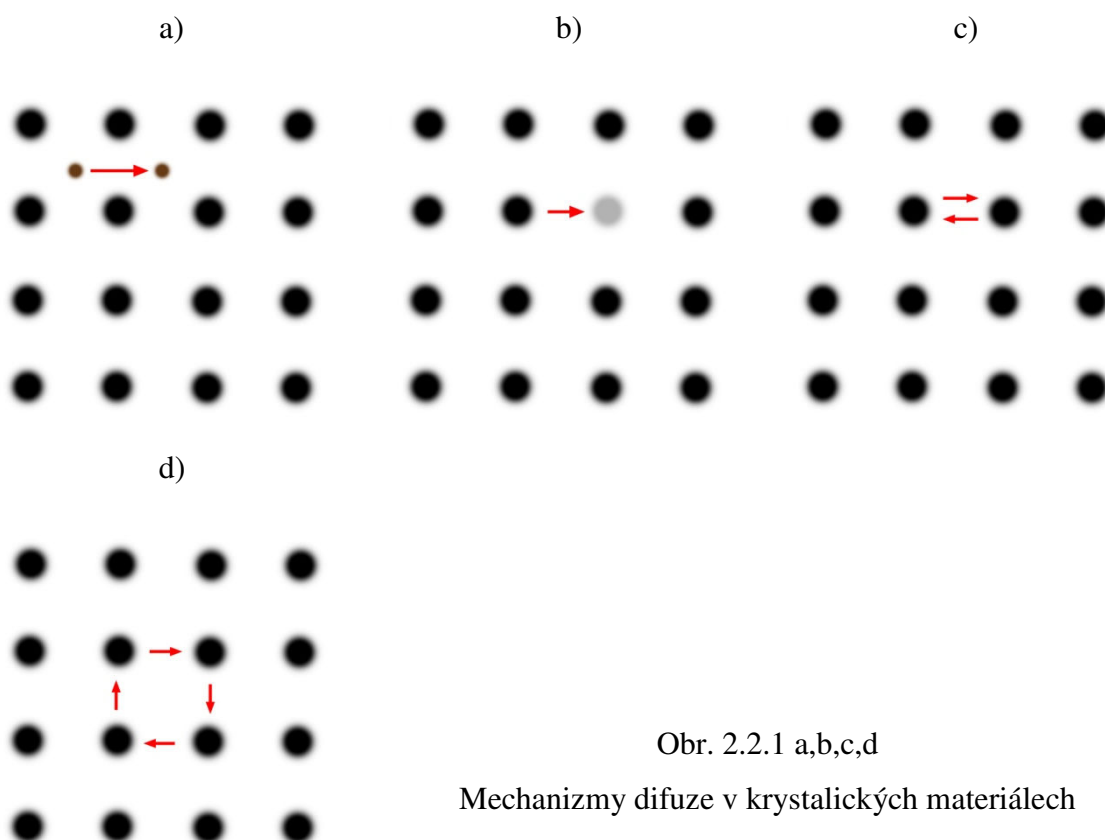
Tento přístup vychází z podrobných představ o pohybu částic hmoty. Umožňuje vyjádřit vztahy mezi náhodným pohybem částic a jejich makroskopickým tokem.

Pohyb jednotlivých atomů v tuhých kovech není zatím přímo pozorovatelný, ale obecně se předpokládá, že je nespojitý a že probíhá vakantními nebo intersticiálními polohami krystalové mřížky [2].

### 2.2.1 Mechanizmy difuze

Pro krystalické látky lze rozlišovat tyto základní mechanizmy:

- a) **Intersticiální** – Intersticiální atom se pohybuje z jedné intersticiální polohy do druhé. Tento mechanismus je energeticky nejméně náročný.
- b) **Vakantní** – Vlastní, nebo substituční atom se přemísťuje do sousední vakance. Na jeho bývalém místě vzniká nová vakance.
- c) **Výměnný** – Dva sousední stejně velké atomy si navzájem vyměňují své polohy. Pravděpodobnost tohoto mechanismu je díky velké energetické náročnosti spotřebované na distorzi mřížky při přechodu velice malá.
- d) **Kruhový** – Několik stejně velkých sousedních atomů si vzájemně „v kruhu“ vymění svá místa. Tento mechanismus je energeticky méně náročný než výměnný.



Obr. 2.2.1 a,b,c,d

Mechanismy difuze v krystalických materiálech

### 2.2.2 Frekvence přeskoků atomů

Předpokládejme, že pro mechanismus difuze, který je podmíněný přítomností mřížkových poruch, je rychlost difuze úměrná jejich počtu [4]. Na základě tohoto předpokladu lze pro vakantní mechanismus difuze vyjádřit frekvenci přeskoků atomu do sousední polohy jako:

$$f_0 = P_v \cdot f_v, \quad (2.2.1)$$

kde  $P_v$  je pravděpodobnost výskytu mřížkové poruchy v sousední poloze a  $f_v$  je frekvence, kterou si atom a mřížková porucha vyměňují své polohy.

Dále se předpokládá, že pravděpodobnost výskytu poruchy  $P_v$  se rovná koncentraci mřížkových poruch  $N_v$  kterou lze vyjádřit jako:

$$N_v = \exp\left(-\frac{\Delta G_f^v}{k \cdot T}\right), \quad (2.2.2)$$

a frekvenci výměny polohy atom-vakance:

$$f_v = \nu_D \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G_m^v}{k \cdot T}\right), \quad (2.2.3)$$

kde  $\Delta G_f^v$  a  $\Delta G_m^v$  jsou volné entalpie vzniku a pohybu mřížkové poruchy,  $\nu_D$  Debyeova frekvence,  $k$  Boltzmannova konstanta a  $T$  termodynamická teplota.

Uvážíme-li, že počet nejbližších sousedních poloh, kterým může atom přeskakovat je dán koordinacním číslem  $\aleph$ , dostáváme pro celkovou frekvenci přeskoků:

$$f_{\aleph} = \aleph \cdot f_0, \quad (2.2.4)$$

Spojením rovnic (2.2.1), (2.2.2), (2.2.3) a (2.2.4) tedy dostáváme výraz:

$$f_{\aleph} = \aleph \cdot \nu_D \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G_m^v}{k \cdot T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta G_f^v}{k \cdot T}\right), \quad (2.2.5)$$

Pro Intersticiální, výměnnou nebo kruhovou difuzi lze odvodit obdobný vztah. Avšak bez nutnosti existence vakance k provedení přeskoků lze vztah zjednodušit a uvažovat pravděpodobnost  $P_v = 1$ .

### 2.2.3 Působení hybné síly na frekvenci přeskoků

Nepůsobí-li na atomy žádná hybná síla, jsou jejich přeskoky náhodné a tudíž ve všech krystalograficky ekvivalentních směrech stejné. Pro tento úkaz lze zavést nový pojem tzv. *energetickou bariéru*, která ve své podstatě, brání pohybu atomů v makroskopickém měřítku. Pokud ale na atomy začne působit hybná síla, dojde ve směru působení této síly ke zmenšení energetické bariéry, frekvence přeskoků se tímto

směrem začne zvyšovat, načež se i atomy začnou v tomto směru makroskopicky pohybovat.

Uvažujeme-li, že působením síly  $F$  se přemístí atom o mřížkový parametr  $a$ , zmenší se tak volná entalpie krystalu o práci touto silou vykonanou. Tedy:

$$\Delta G_{m+} = F \cdot a, (2.2.6)$$

Dále se předpokládá, že aktivační volná entalpie  $\Delta G_m$ , potřebná pro přeskok z výchozí polohy do nové, je rovna rozdílu entalpií krystalu ve kterém je atom ve výchozí poloze  $\Delta G_{m0}$  a stavem, kdy je atom zhruba v polovině cesty mezi výchozí a konečnou polohou. Matematicky zapsáno:

$$\Delta G_m = \Delta G_{m0} - \frac{\Delta G_{m+}}{2}, (2.2.7)$$

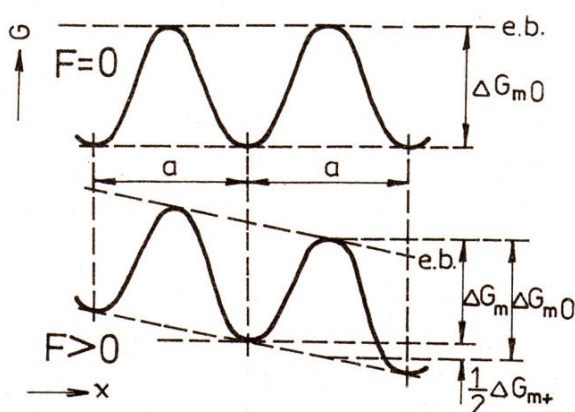
Frekvence přeskoků ve směru působící hybné síly lze vyjádřit jako:

$$f_+ = f_0 \cdot \exp\left(\frac{\Delta G_{m+}}{2 \cdot k \cdot T}\right), (2.2.8)$$

kde  $f_0$  je podle (2.2.1) frekvence přeskoků atomu bez působení hybné síly.

Pokud je  $\Delta G_{m+} \ll k \cdot T$ , lze na základě Taylorova rozvoje po dosazením vztahu (2.2.6) frekvenci přeskoků ve směru působení hybné síly vyjádřit jako:

$$f_+ = f_0 \cdot \left(1 + \frac{F \cdot a}{2 \cdot k \cdot T}\right), (2.2.9)$$



Obr. 2.2.2 Závislost volné entalpie na poloze atomu v krystalické mřížce a vliv hybné síly [4]

## 2.2.4 Střední kvadratické přemístění atomů

Tato veličina určuje vzdálenost, o kterou se atom stálou frekvencí  $f$  přemístí po  $n$  přeskocích.

Pokud je  $r_i$  vektor odpovídající  $i$ -tému přeskoku, pak po sérii  $n$  přeskoků odpovídá výsledný polohový vektor vzhledem k původní poloze:

$$R_n = \sum_{i=1}^n r_i, \quad (2.2.10)$$

Střední hodnotu lze vyjádřit jako:

$$R_n^2 = \sum_{i=1}^n r_i^2 + 2 \cdot \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n r_i \cdot r_j, \quad (2.2.11)$$

Jsou-li přeskoky náhodné, mohou se členy  $r_i$  a  $r_j$  rozdělit do dvojic tvořených členy se stejnou hodnotou ale opačným znaménkem. Součet těchto dvojic se tak blíží roven nule a výraz lze zjednodušit na tvar:

$$\overline{R_n^2} = \sum_{i=1}^n \overline{r_i^2}, \quad (2.2.12)$$

Pokud atomy mohou přeskočit pouze do  $\aleph$  sousedních poloh a definujeme-li frekvenci přeskoků do  $i$ -té polohy jako:

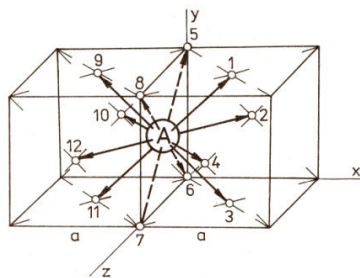
$$f_i = \frac{\overline{n_i}}{\tau}, \quad (2.2.13)$$

kde  $\tau$  je doba potřebná pro  $n$  přeskoků, pak střední kvadratické přemístění lze definovat jako:

$$\overline{R_n^2} = \tau \cdot \sum_{i=1}^{\aleph} f_i \cdot r_i^2, \quad (2.2.14)$$

Pro kubickou plošně středěnou mřížku s parametrem  $a$  je velikost vektoru nejbližších sousedních poloh  $r_i = a/2$  jejichž počet je dán číslem  $\aleph = 12$ . Pokud podle obrázku 2.2.2 uvažujeme přemístění pouze ve směru osy  $x$ , tedy vektory 1-4 a 9-12 dostáváme vztah  $\sum_{i=1}^{\aleph} x_i^2 = 8 \cdot \frac{a^2}{2^2}$ . Po dosazení do rovnice 2.2.14 získáme střední kvadratické přemístění ve směru osy  $x$  pro k.p.s. mřížku:

$$\overline{X_n^2} = 2 \cdot a^2 \cdot f_i \cdot \tau, \quad (2.2.15)$$



Obr. 2.2.3 Vektory možných přeskoků v k.p.s. mřížce [4]

## 2.2.5 Jednorozměrný difuzní tok

Uvažujme dvě sousední atomové roviny, jež jsou kolmé k myšlenému směru  $x$  a mezi nimiž existuje gradient koncentrace difundujícího prvku v tomtéž směru.

Jsou-li v těchto rovinách plošné hustoty difundujících atomů  $N_1$  a  $N_2$ , přičemž mezi nimi neexistují žádné hybné síly  $F$ , jsou frekvence přeskoků v obou směrech stejné  $f_0 = f_{+x} = f_{-x}$  a lze výsledný difuzní tok ve směru osy  $x$  vyjádřit jako:

$$J = J_{+x} - J_{-x} = (N_1 - N_2) \cdot f_0, \quad (2.2.16)$$

Vyjádříme-li rozdíl plošných koncentrací jako:

$$N_1 - N_2 = -a \cdot \frac{\partial N}{\partial x}, \quad (2.2.17)$$

kde  $a$  je vzdálenost mezi sousedními rovinami a  $\frac{\partial N}{\partial x}$  je gradient plošné hustoty.

Dále pokud vztah mezi plošnou hustotou a objemovou koncentrací je dán výrazem:

$$N = a \cdot c, \quad (2.2.18)$$

Pak lze kombinací těchto tří rovnic odvodit I. Fickův zákon ve tvaru:

$$J = -a^2 \cdot f_0 \cdot \frac{\partial c}{\partial x}, \quad (2.2.19)$$

Vyjádřující jednorozměrný difuzní tok, vlivem gradientu koncentrace difundujícího prvku. Součin  $a^2 \cdot f_0 = D_i$  vyjadřuje difuzní součinitel, nebo též difuzivitu prvku  $i$ .

Pokud je difuzní součinitel u kovů s k.p.s. mřížkou při teplotách blízkých teplotě tání  $D \approx 10^{-12} [m^2/s]$  a mřížkový parametr  $a \approx 10^{-10} [m]$ , pak pro frekvenci přeskoků musí platit  $f_0 \approx 10^8 [1/s]$ . Pokud je frekvence tepelných kmitů  $\nu_D \approx 10^{12-13} [1/s]$ , pak atom vykoná přeskok do nové polohy každý svůj  $10^{4-5}$  kmit.

## 2.3 Fenomenologický přístup

Popisuje kinetiku přenosových jevů pomocí obecných zákonů, aniž by předpokládal jakékoliv atomární mechanismy.

### 2.3.1 Obecné pojetí

Podle Onsagerových relací reciprocity, závisí tok obecné termodynamické veličiny  $J_i$ , tedy množství které projde jednotkou plochy za čas, lineárně na každé hybné síle  $X_j$ , která v systému působí. Tedy:

$$J_i = \sum_j L_{ij} \cdot X_j, (2.3.1)$$

kde  $L_{ij}$  jsou Onsagerovy fenomenologické součinitele. Tyto součinitele lze maticově zapsat do tvaru  $|L_{ij}|$ , kde diagonální členy ( $i = j$ ) vyjadřují vliv hybné síly na tok vlastní termodynamické veličiny a na členy ostatní ( $i \neq j$ ), které vyjadřují vliv  $j$ -té síly  $X_j$  na  $i$ -tou termodynamickou veličinu a obráceně. Pro tyto součinitele platí tzv.

Onsagerovy vztahy reciprocity:

$$L_{ij} = L_{ji}, (2.3.2)$$

Kde  $j$ -tá hybná síla má stejný vliv na tok  $i$ -té termodynamické veličiny, jako  $i$ -tá síla na tok  $j$ -té termodynamické veličiny.

Tento obecný přístup je vhodný například k vyjádření difuze za současného působení více hybných sil, kterými může být například gradient tlaku, teploty, chemického potenciálu a dalších vhodných potenciálů.

### 2.3.2 Fickovy zákony

První fenomenologický popis difuze představil německý fyziolog Adolf Eugen Fick již v roce 1855. Je zajímavé, že Fick se ve svých experimentech zabýval difuzí v solných roztocích, neboť přenos hmoty v tuhých látkách se v té době považoval za nemožný.

Fickovy zákony jsou zvláštním případem obecného pojetí, které jsou založeny na předpokladu, že hybnou silou difuze je gradient koncentrace. Ten však ve skutečnosti není hybnou silou, ač je tak často označován. Pouze mění velikost sousedních energetických bariér a přesto, že frekvence přeskoků ve směru tohoto gradientu je stejná jako ve směru proti němu, jsou přeskoky v tomto směru energeticky výhodnější [4].

I přes nemožnost vyjádření složitějších přenosových jevů je toto pojetí pro svou jednoduchost stále velice rozšířené.



**I. Fickův zákon** – platí pro stacionární difuzi, kdy koncentrace difundujícího prvku v daném místě nezávisí na čase. Tento zákon vyjadřuje rovnice:

$$J_i = -D \cdot \nabla c_i, \quad (2.3.3)$$

kde  $J_i \left[ \frac{\text{mol}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \right]$  je difuzní tok prvku i,  $D \left[ \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \right]$  difuzní součinitel a  $\nabla c_i \left[ \frac{\text{mol}}{\text{m}^4} \right]$  gradient koncentrace prvku i.

Minusové znaménko ve vztahu znamená, že tok prvků probíhá proti směru gradientu koncentrace. Tento vztah je vhodný například k vyjádření difuze plynů kovovými membránami.

**II. Fickův zákon** – vyjadřuje vztahy při nestacionární difuzi, kdy je koncentrace daného prvku funkcí času a polohy. Obecná formulace je dána výrazem:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \nabla(D \cdot \nabla c), \quad (2.3.4)$$

Pokud uvažujeme izotropní prostředí s konstantním difuzním koeficientem, přechází výraz ve tvar:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = D \cdot \nabla^2 c, \quad (2.3.5)$$

Jenž v jednorozměrném případě difuze ve směru osy x vyjádříme jako:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}, \quad (2.3.6)$$

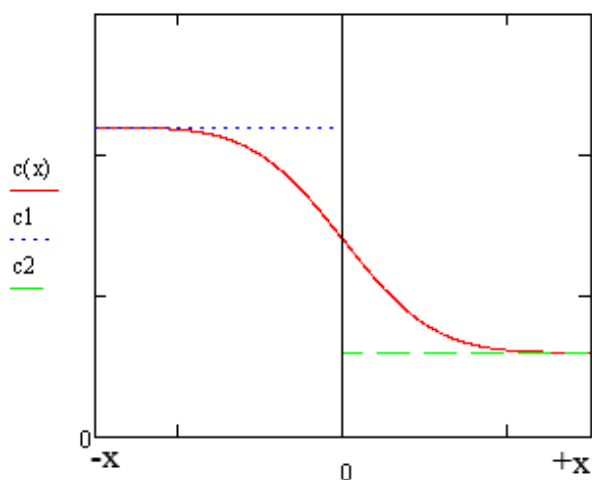
Analytické řešení této diferenciální rovnice závisí na počátečních podmínkách difuzního článku.

Pro difuzní mezi **dvěma poloprostory** s počátečními podmínkami pro:

1. poloprostor, kde  $x < 0$  je v čase  $t=0$  konstantní koncentrace  $c=c_1$
2. poloprostor, kde  $x > 0$  je v čase  $t=0$  konstantní koncentrace  $c=c_2$

Lze průběh koncentrace vyjádřit jako:

$$c(x, t) = c_2 + \frac{c_1 - c_2}{2} \cdot \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} \right) \right], \quad (2.3.7)$$

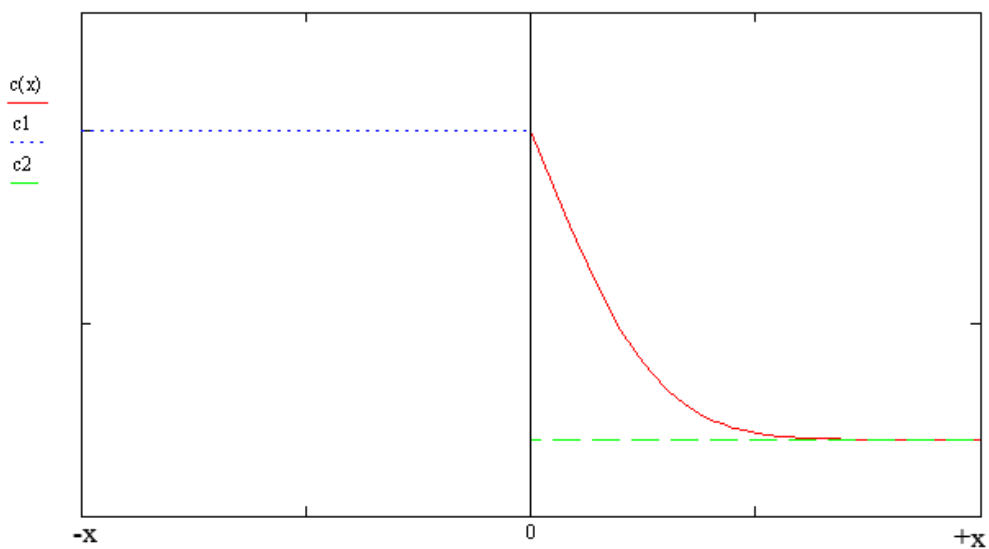


Obr. 2.3.1 Koncentrační profil při difuzi mezi dvěma poloprostory

Pro difuzi do **polonekonečného prostředí** o koncentraci prvku  $C_2$ , na jehož rozhraní je udržována konstantní koncentrace  $C_1 > C_2$  jako:

$$c(x, t) = c_2 + (c_1 - c_2) \cdot \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}} \right) \right] , \quad (2.3.8)$$

Funkce *erf* je chybová funkce, jejíž hodnoty jsou tabelovány.



Obr. 2.3.2 Koncentrační profil pro difuzi do polonekonečného prostředí

### 2.3.3 Kvazistacionární model difuze

V difuzním článku tvořeném natupo svařenou uhlíkovou a silně legovanou ocelí lze často pozorovat jev, kdy uhlík difunduje nespojitě proti svému koncentračnímu spádu. Tento jev je označován jako tzv. obrácená difuze, či difuze do kopce. K popisu takto složitého přenosového jevu ve vícesložkové soustavě již zákonitě nestačí předpokládat gradient koncentrace jako hnací sílu, ale je nutno uvažovat gradient chemického potenciálu potažmo gradient termodynamické aktivity.

Pokud však aktivita uhlíku závisí na chemickém složení uvažované oceli, bude se její hodnota s časem měnit spolu se současnou difuzí substitučních prvků. Tento problém řeší kvazistacionární model difuze, který je založen na faktu, že intersticiální prvky difundují o několik řádů vyšší rychlostí nežli prvky substituční. Intersticiální uhlík se podle tohoto modelu přizpůsobí rozložení substitučních prvků, které je považováno za neměnné a novým rozložením uhlíku zpětně neovlivněné.

Difuzní rovnici pro jednorozměrný tok je poté možno psát jako:

$$\frac{\partial a_c}{\partial \tau} = \gamma_c \cdot D^a \cdot \frac{\partial^2 a_c}{\partial x^2} \quad , (2.3.9)$$

kde  $a_c$  je termodynamická aktivita uhlíku,  $\gamma_c$  aktivní koeficient a  $D^a$  difuzní koeficient.

Termodynamická aktivita uhlíku je definována jako součin aktivního koeficientu s molárním zlomkem uhlíku v roztoku, tedy:

$$a_c = \gamma_c \cdot N_c \quad , (2.3.10)$$

K vyjádření aktivního koeficientu použijeme vztah:

$$\gamma_c = \exp\left(\sum \epsilon_c^j \cdot N^j\right) \quad , (2.3.11)$$

jenž na základě aditivnosti účinků ve vícesložkové soustavě vyjadřuje vliv každého substitučního prvku prostřednictvím svého interakčního součinitele  $\epsilon_c^j$  a molárního zlomku  $N^j$ .

Interakční koeficient každého prvku  $\epsilon_c^j$  lze v austenitu vyjádřit na základě empirického vztahu:

$$\epsilon_c^j = \left(-11 + \frac{37500}{T}\right) \cdot \ln \frac{v_c^j}{6} \cdot \exp\left(-0,684 \cdot \ln \frac{v_c^j}{6}\right) \quad , (2.3.12)$$

kde  $v_c^j$  je číslo charakterizující elektronovou strukturu tuhého roztoku Fe-C-j.

Rovnice 2.3.12 je založena na často přijímaném předpokladu, podle něhož jsou interakční koeficienty funkcí hustoty valenčních elektronů. Prvky  $j$  zvyšující v tuhém roztoku Fe-C hustotu pásma valenčních elektronů zvyšují podle této představy odpudivé síly mezi uhlíkem a prvky roztoku. Zvyšují tak aktivitu uhlíku a mají kladnou hodnotu interakce. Charakteristické číslo  $v_c^j$  tak udává počet valenčních elektronů, které přecházejí do elektronového pásma [7].

Difuzní koeficient  $D^a$  vyjádříme pomocí vztahu:

$$D^a = \frac{D_c}{\gamma_c^2}, \quad (2.3.13)$$

v němž  $D_c$  vyjadřuje teplotní závislost pomocí Arrheniova vztahu:

$$D_c = D_0 \cdot \exp\left(\frac{-\Delta H}{R \cdot T}\right), \quad (2.3.14)$$

Difuzní koeficienty  $D_0$  při absolutní nule teploty a aktivační entalpie  $\Delta H$  pro různé prvky jsou uvedeny v tabulce 2.3.1.

Difuzní prostředí	Difundující prvek	$D_0$	$\Delta H$	Rozmezí teplot
Fe $\gamma$	H	$6,7 \cdot 10^{-7}$	45,1	350-1050
	B	$2,0 \cdot 10^{-7}$	87,9	950-1300
	C	$4,0 \cdot 10^{-5}$	140	500-1100
	N	$2,0 \cdot 10^{-5}$	151	900-1350
	Cr	$1,7 \cdot 10^{-5}$	264	900-1350
	Mn	$1,8 \cdot 10^{-5}$	264	900-1350
	Mo	$3,6 \cdot 10^{-6}$	240	1050-1350
	Ni	$1,1 \cdot 10^{-5}$	273	950-1350
	Ti	$1,5 \cdot 10^{-5}$	251	1050-1250
	V	$2,8 \cdot 10^{-5}$	264	1100-1350
	W	$5,1 \cdot 10^{-5}$	272	1000-1300

Tab.2.3.1 Difuzní charakteristiky vybraných prvků v austenitu [5]

Charakteristické číslo $v_c^j$	Perioda						
	1	2	3	4	5	6	7
1				Sc	Y		
2				Ti	Zr	Hf	Ku
3				V	Nb	Ta	
4				Cr	Mo	W	
5		F	Cl	Mn, Br	Tc, J	Re, At	
6	He	Ne	Ar	Fe, Kr	Ru, Xe	Os, Ru	
7	H		Na	K, Co	Rb, Rh	Cs, Ir	Fr
8			Mg	Ca, Ni	Sr, Cd	Ba, Pt	Ra
9		B	Al	Cu	Ag	Au	
10		C	Si	Zn	Cd	Hg	
11		N	P	Ga	In	Tl	
12			S	Ge	Sn	Pb	
13				As	Sb	Bi	
14				Se	Te	Po	

Tab.2.3.2 Přiřazení charakteristických čísel  $v_c^j$  k jednotlivým prvkům [7]

## 2.4 Rovnovážné poměry v sytící atmosféře

Při rozboru působení sytícího prostředí na materiál vycházíme ze zákonů chemické termodynamiky, kterými vyjadřujeme rovnovážné konstanty rovnic popisujících chemické reakce v dané soustavě.

Přenos uhlíku mezi plynným prostředím a materiálem lze popsat pomocí dvou základních vratných reakcí:



Tedy soustavu kysličník uhličitý – kysličník uhelnatý (1) a soustavu metan – vodík (2). Uvažujeme nejprve první tzv. Boudouardovu reakci, ze které lze nejsnáze odvodit podmínky rovnováhy mezi složkami atmosféry a uhlíkem rozpuštěným v austenitu. V této soustavě je uhlík obsažen v plynné fázi v atomární podobě  $C_{(g)}$ , kde vyvozuje určitý parciální tlak  $p_{c(g)}$ , jenž závisí na parciálním tlaku kysličníku uhličitýho  $p_{co2}$  a uhelnatého  $p_{co}$ .

Vzájemná rovnováha této reakce je poté dána vztahem:

$$K_1 = \frac{p_{CO_2} \cdot p_{c(g)}}{p_{CO}^2}, \quad (2.4.1)$$

kde  $K_1$  je rovnovážná konstanta, jejíž teplotní závislost lze na základě empirického vztahu vyjádřit jako:

$$\log K_1 = \frac{8870}{T} - 9,060, \quad (2.4.2)$$

Parciální tlak uhlíku podle vztahu 2.4.1 je mírou nauhličovacích schopností atmosféry [2].

Stejně jako v atmosféře, vyvozuje i v austenitu uhlík určitý parciální tlak  $p_{c(\gamma)}$ .

O tom v jakém směru bude probíhat reakce rozhoduje změna volné entalpie:

$$\Delta G = -R \cdot T \cdot \ln \frac{p_{c(g)}}{p_{c(\gamma)}}, \quad (2.4.3)$$

Pokud je  $\Delta G$  záporná, probíhá v oceli nauhličování. Při kladné změně  $\Delta G$  probíhá oduhlčování a při  $\Delta G = 0$  je atmosféra s ocelí v rovnováze a nenastává přenos v žádném směru.

Vzhledem k tomu, že parciální tlaky uhlíku jsou prakticky neměřitelné, nahrazují se hodnotami jejich termodynamických aktivit, které jsou jim úměrné. Aktivita uhlíku v plynné atmosféře je dána poměrem parciálních tlaků ve zkoumaném a standardním stavu (v rovnováze s grafitem).

$$a_{c(g)} = \frac{p_{c(g)}}{p_{c(0)}}, \quad (2.4.4)$$

Zhledem k tomu, že aktivita standardního stavu je vždy rovna 1, lze kombinací vztahu 2.4.1 a 2.4.4 vyjádřit aktivitu uhlíku v plynné atmosféře jako:

$$a_{c(g)} = p_{c(g)} = K_1 \cdot \frac{p_{CO}^2}{p_{CO_2}}, \quad (2.4.5)$$

Aktivita uhlíku v austenitu je podle již známého vztahu 2.3.10 vyjádřena jako:

$$a_{c(\gamma)} = N_c \cdot \gamma_c$$

Z podmínky rovnováhy  $\Delta G = 0$  pak platí:

$$a_{c(g)} = a_{c(\gamma)}, \quad (2.4.6)$$

tedy že aktivita uhlíku v austenitu je rovna aktivitě uhlíku v atmosféře která jej obklopuje. Z této podmínky lze kombinací vztahu 2.3.10 a 2.4.5 vyjádřit množství obsaženého uhlíku v austenitu  $N_c$  se kterým je atmosféra v rovnováze jako:

$$N_c = \frac{a_c}{\gamma_c} = \frac{K_1}{\gamma_c} \cdot \frac{p_{CO}^2}{p_{CO_2}}, \quad (2.4.7)$$

Tedy koncentraci uhlíku, která se ustálí na povrchu oceli za působení aktivní (syťící) atmosféry.

Při uvažování čistě uhlíkové oceli bez jakýchkoliv legujících příměsí se roztok chová jako ideální směs, v níž je součinitel aktivity  $\gamma_c = 1$ . Tato koncentrace se poté číselně shoduje s aktivitou uhlíku v atmosféře, potažmo uhlíkovým potenciálem syťící atmosféry. Neboť stejně tak plynné prostředí lze považovat za téměř ideální směs, v níž se aktivita uhlíku rovná chemickému potenciálu uhlíku.

V následujících výpočtech proto budeme aktivitu v austenitu a atmosféře rozlišovat jako „aktivitu“ pro austenit a „uhlíkový potenciál“ pro atmosféru. Pro potřeby výpočtu značený jako  $c_p$

Obdobné vztahy jako v kysličnickové soustavě (1), lze odvodit i v soustavě (2) metan-vodík s tím, že reakce je popsána konstantou  $K_2$  jako :

$$K_2 = \frac{p_{H_2}^2 \cdot p_{c(g)}}{p_{CH_4}}, \quad (2.4.8)$$

Přičemž jeden z možných empirických vztahů vyjadřující teplotní závislost je dán vztahem:

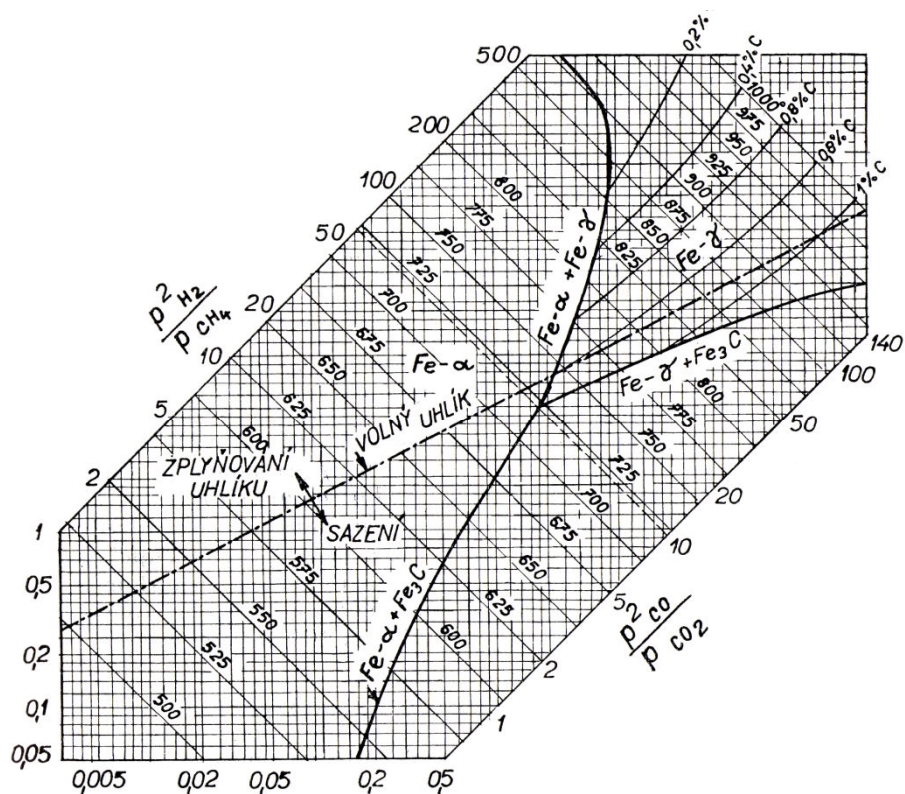
$$\log K_2 = -\frac{4650}{T} + 5,770, \quad (2.4.9)$$

Skutečné cementační atmosféry jsou multikomponentní, obsahují tedy více dílčích soustav. V takovýchto soustavách lze ke snadné regulaci uhlíkového potenciálu využít pravidla o rovnováze dílčích soustav. Toto pravidlo vyjadřuje rovnost parciálních tlaků uhlíku vyvozovaných v každé z dílčích soustav. Pro reakce (1) a (2) pak platí:

$$a_{c(g)} = K_1 \cdot \frac{p_{CO}^2}{p_{CO_2}} = K_2 \cdot \frac{p_{CH_4}}{p_{H_2}^2}, \quad (2.4.10)$$

Z praktického hlediska tak k určení  $c_p$  stačí, abychom znali pouze parciální tlaky plynných složek jedné z dílčích soustav.

Grafické znázornění rovnováhy dílčích soustav (1) a (2) je znázorněn v Neumannově digramu převzatého z práce [2].



Obr. 2.4.1 Neumannův diagram

Z diagramu lze například na základě zadané rovnovážné konstanty jedné z dílčích soustav určit, při jaké teplotě ještě dochází ke zplyňování volného uhlíku a kdy se začínají vylučovat saze, či jaký bude uhlíkový potenciál směsi při dané teplotě a rovnovážné konstantě.



## 2.5 Metoda konečných diferencí

Parciální diferenciální rovnici nazýváme takovou, ve které se vyskytují parciální derivace hledané funkce dvou a více proměnných.

Evoluční parciální diferenciální rovnice parabolického typu má nejčastěji tvar:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + L(u) = f, \quad (2.5.1)$$

kde  $t$  je čas,  $L$  je eliptický parciální operátor druhého řádu v prostorových proměnných,  $f$  je funkce popisující hustotu rozložení zdrojů a  $u$  je hledaná funkce [8].

Difuze v aktivní atmosféře s konstantním uhlíkovým potenciálem je typická počátečně-okrajová úloha, v níž neuvažujeme žádné vnitřní zdroje a koeficient difuze nezávislý na koncentraci (aktivitě). Rovnice má poté tvar:

$$D\nabla u - \frac{\partial u}{\partial t} = 0, \quad (2.5.2)$$

Úlohu řešíme na množině  $Q = \Omega \times (0, T)$ , kde  $\Omega$  je oblast vymezující prostorovou proměnnou a  $T > 0$  je časová konstanta. V jednorozměrném případě má množina  $Q$  tvar obdélníku v rovině  $(x, t)$ . Ohraničíme-li prostorovou oblast souřadnicemi  $x = (0, 1)$ , lze úlohu zadat s třemi následujícími podmínkami:

$$1. \quad u(x, 0) = \phi(x)$$

počáteční podmínku popisující rozložení v čase  $t=0$

$$2. \quad u(0, t) = g_0(t)$$

$$3. \quad u(1, t) = g_1(t)$$

okrajovými podmínkami určující hodnoty v krajních oblastech na celém časovém intervalu  $(0, T)$ .

Jedním z možných způsobů řešení takovéto úlohy je právě metoda konečných diferencí. Podstatou této metody je pokrytí zkoumané oblasti sítí uzlových bodů, v nichž nahrazujeme derivace příslušnými diferencemi, tedy lineární kombinací funkčních hodnot v okolních bodech v závislosti na použitém diskretizačním schématu.

Nejjednodušší bezpodmínečně stabilní schéma je dvouvrstvé implicitní, které spočívá v nahrazení derivace podle  $t$  diferenčním podílem:

$$\frac{\partial u(x_i, t_j)}{\partial t} \approx \frac{u(x_i, t_j) - u(x_i, t_{j-1})}{k}, \quad (2.5.3)$$

a v aproximaci druhé derivace podle  $x$  druhou poměrnou diferencí:

$$\frac{\partial^2 u(x_i, t_j)}{\partial x^2} \approx \frac{u(x_{i-1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i+1}, t_j)}{h^2}, \quad (2.5.4)$$

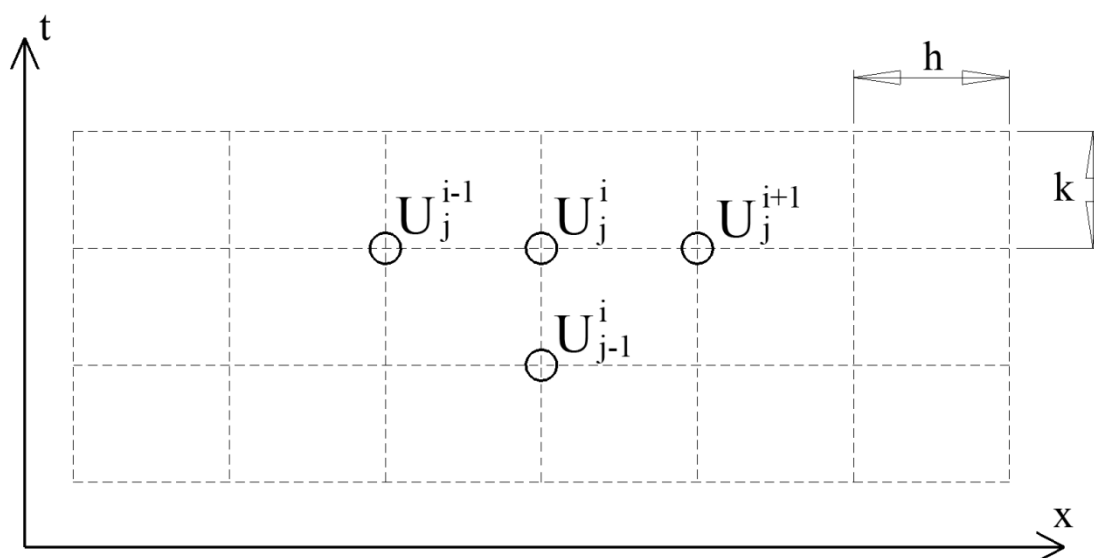
kde  $k$  a  $h$  jsou velikosti kroků mezi uzly. Úloha je poté popsána pro každý vnitřní uzel diferenčními rovnicemi ve tvaru:

$$\frac{U_j^i - U_{j-1}^i}{k} = D \cdot \frac{U_j^{i-1} - 2U_j^i + U_j^{i+1}}{h^2}, \quad (2.5.5)$$

Řešení každé časové vrstvy  $j$  vede k soustavě lineárních algebraických rovnic. Pomocí implicitního schéma je tedy nutno řešit celou časovou vrstvu najednou.

Algoritmus metody je následující:

1. Zvolení velikosti časového a délkového kroku  $k$  a  $h$ .
2. Sestrojení sítě  $S = \{(x_i, t_j), i = 0, 1, \dots, I, j = 0, 1, \dots, J\}$
3. Vyjádření nulté časové vrstvy  $U_0^i$  na základě počáteční podmínky.
4. Sestavení a vyřešení soustavy rovnic pro první časovou vrstvu podle 2.5.5, kde  $U_j^0$  a  $U_j^I$  jsou krajní uzly dané pomocí okrajových podmínek.
5. Opakování kroku 4 pro každou následující časovou vrstvu až do vrstvy konečné.



Obr. 2.5.1 Implicitní schéma

## 2.6 Software TTSteel

Tento program slouží k predikci mechanických vlastností a fázového složení ocelí po jejich tepelném zpracování. Program na základě chemického složení a počátečních vlastnostech austenitického zrna vytváří hybridní izotermický diagram, který je následně použit k simulaci anizotermického rozpadu austenitu podle definované chladicí křivky. Ochlazovací křivka je rozdělena na úseky s konstantní rychlostí, pro které je počítán podíl výsledné rozpadové struktury. Poté je počítána výsledná mez kluzu a tvrdost, ze které je následně odvozena mez pevnosti.

### 2.6.1 Rozsah použitelnosti z hlediska chemického složení

Každý nový projekt, simulující tepelné zpracování oceli je nutno nejprve přesně definovat chemickým složením uvažované oceli a stavem počátečního austenitu.

Projekty se na základě chemického složení dělí do tří skupin, z nichž každá má rozdílné přípustné hodnoty legujících prvků:

- a) **Uhlíkové a konstrukční legované oceli** s obsahem uhlíku od 0,008% do 0,5% a s celkovým obsahem legur do 10%
- b) **Nástrojové oceli** s obsahem uhlíku od 0,5% do 1,8% a s celkovým obsahem legujících prvků do 5% pro obsah uhlíku menší než 1,2% nebo s celkovým obsahem legujících prvků do 3% pro obsah uhlíku větší než 1,2%
- c) **Mikrolegované oceli** s obsahem uhlíku od 0,05% do 0,4%, přičemž součet legur Nb + Ti musí být větší než 0.

### 2.6.2 Hybridní rozpadový diagram

Průmyslový způsob ochlazování neodpovídá ochlazovacím křivkám použitým ke konstrukci klasických rozpadových diagramů IRA a ARA, tedy buď za konstantní teploty či při konstantní rychlosti ochlazování. Proto byl pro potřeby použití jakéhokoliv tvaru ochlazovací křivky na základě informací z předešlých typů diagramů sestaven model hybridního rozpadového diagramu.

Pomocí vícenásobných regresních analýz výše zmiňovaných diagramů byl vysledován vliv základních legujících prvků na souřadnice kritických bodů, jako čas nosu vzniku a

konce feritu, perlitu, bainitu a vzniku martenzitu. Obecná ochlazovací křivka je poté rozložena na řadu úseků s konstantní rychlostí ochlazování, pro které se počítají příspěvky k rozpadu austenitu pomocí Avramiho rovnice.

### 2.6.3 Získání ochlazovacích křivek

Ochlazovací křivky, které budou použity k výpočtu mechanických vlastností lze získat dvěma způsoby. Pokud jsou uživateli známy skutečné časové průběhy teplot v uvažované oceli, lze ochlazovací křivku zadat do programu přímo jako soustavu dvojic čas - teplota.

Druhý způsob získávání ochlazovacích křivek skýtá integrovaný modul, který pro základní tvary těles dokáže ochlazovací křivky spočítat a to až v deseti po sobě následujících nezávislých ochlazovacích sekvencích.

Vstupní parametry ovlivňující tento výpočet jsou:

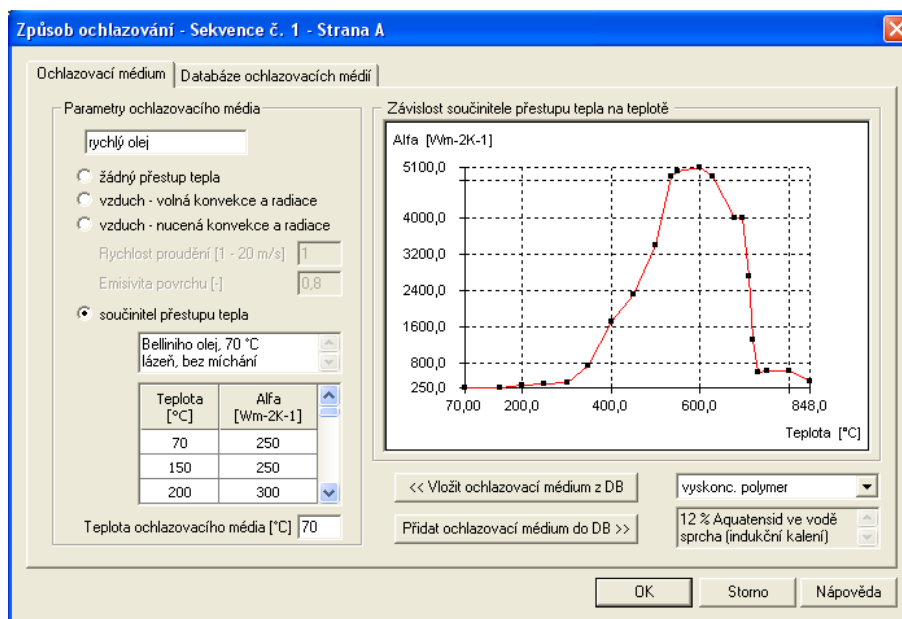
- a) chemické složení uvažované oceli, ze kterého se počítá měrné teplo, hustota a tepelná vodivost
- b) počáteční rovnoměrná teplota na začátku ochlazování
- c) rozměry a tvar tělesa
- d) parametry ochlazovacího média
- e) sled zvolených chladících sekvencí

Možné tvary tělesa jsou základní 2D profily, tedy: tyč kruhového nebo obdélníkového průřezu, válec, prstenec a trubka. V důsledku osové symetrie těchto profilů počítá program ochlazování pouze na symetrické části průřezu.

Parametry ochlazovacího média se rozumí jeho teplota a způsob ochlazování. Možné způsoby ochlazování jsou:

- a) žádný přestup tepla – těleso je dokonale tepelně izolováno
- b) vzduch - volná konvekce a radiace, lze nastavit emisivitu povrchu
- c) vzduch - nucená konvekce a radiace, lze nastavit emisivitu povrchu a rychlost proudění vzduchu
- d) médium s definovanými součiniteli přestupu tepla – tedy závislostí součinitele přestupu tepla na aktuální teplotě tělesa

Médium definované pomocí součinitelů přestupu tepla lze získat jak z poměrně obsáhlé databáze skutečných chladiv či nadefinovat médium vlastní. Každé nově definované médium lze uložit do databáze a použít tak v dalších projektech. U tohoto způsobu ochlazování se předpokládá, že součinitele přestupu již v sobě zahrnují i přestup tepla zářením.



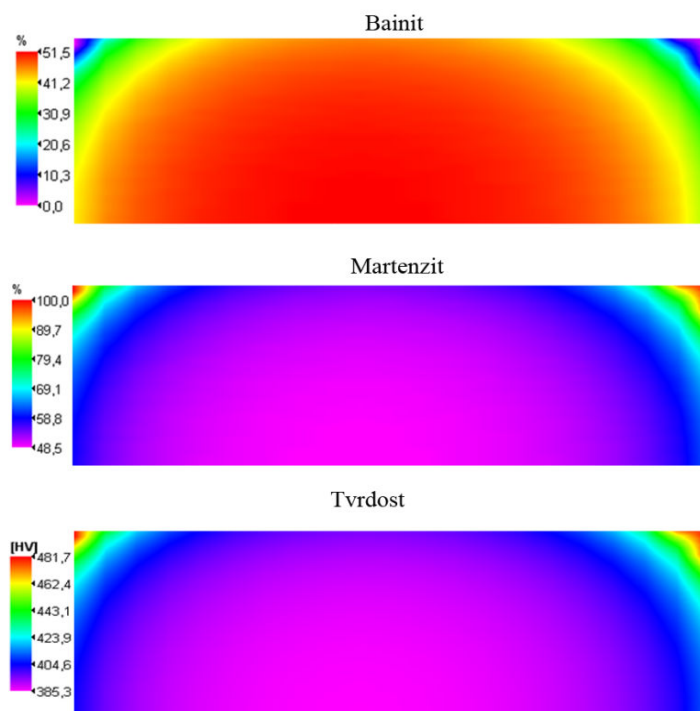
Obr. 2.6.1 Definování způsobu ochlazování

Pro každou chladicí sekvenci lze různě kombinovat nezávislé způsoby ochlazování a to i pro jednotlivé části tělesa. Lze tak například uvažovat chlazení obdélníkové tyče v olejové lázni po určitou dobu a její následné dochlazení na vzduchu, jenž proudí určitou rychlostí pouze ze dvou stran.

Křivky jsou počítány pro vybrané body, jež mohou být povrch, zadaná hloubka pod povrchem či střed tělesa. Oba druhy ochlazovacích křivek lze použít k predikci mechanických vlastností a fázového složení, či je uložit do databáze a zpřístupnit je tak i pro další projekty. Mimo tyto samostatné chladicí křivky je nezávisle z každé provedené simulace vygenerován záznam rozložení teplot během celého ochlazování.

## 2.6.4 Rozložení teplot, fází a mechanických vlastností v tělese

Pro simulované těleso lze zobrazit rozložení těchto vlastností ve vlastním dialogu, v němž jsou výsledky zobrazeny pomocí barevných map viz obrázek 2.6.2. Výpočet není omezen pouze na tělesa spočítaná interním ochlazovacím modulem. Do dialogu lze vložit i těleso se spočítanými teplotami pomocí externích MKP programů. Podporovány jsou výstupy z programů FLUX2D a FormFEM.



Obr. 2.6.2 Ukázka výsledků simulace v barevných mapách

Možnosti programu nejsou omezeny pouze na simulaci kalení. Mimo toto tepelné zpracování lze simulovat:

- žhánání do teplot  $A_{c1}$
- termomechanické zpracování – pomocí definování zbytkové deformace austenitu
- popouštění

Ze všech dosažených výsledků lze vygenerovat technickou zprávu ve formátu RTF.

Program TTSteel je tedy komplexním nástrojem, vhodným k simulaci většiny procesů tepelného zpracování oceli. Hlavním úkolem diplomové práce však bylo vypracování metodiky rozšíření tohoto programu o možnost simulace chemicko-tepelného zpracování, jímž se zabývá experimentální část.

### 3. EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

Experimentální část sestává ze seznámení se s materiálem a podmínkami jejího chemicko-tepelného zpracování.

Výpočtu průběhu cementování v plynném prostředí s využitím kombinace jak analytického řešení kvazistacionárního modelu difuze, tak pomocí metody konečných diferencí.

Vypočtený průběh koncentrace uhlíku je po té použit k vlastní simulaci průběhu kalení pomocí software TTSteel.

#### 3.1 Materiál a jeho chemicko-tepelné zpracování

K provedení simulace byla vybrána ocel **TL 4521**.

Jedná se o nízkolegovanou, nízkouhlíkovou, niklovou ocel vhodnou k cementování.

Ocel je vhodná například k výrobě ozubených kol, hřídelí a pohonných jednotek.

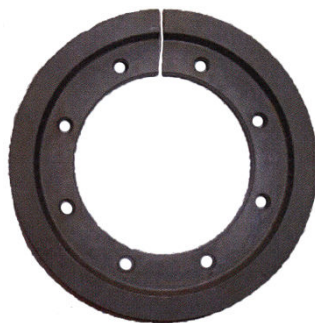
Výběr právě této oceli nebyl nikterak náhodný. Tato volba umožňuje navázat na práci [6] a využít tak výsledků a měření, které byly na stejném materiálu při stejných podmínkách chemicko-tepelného zpracování v minulosti již provedeny.

Vzorek použitý v experimentální části práce [6] kopíruje tvar ozubeného kola. Má proto tvar prstence o rozměrech:

$$D=190\text{mm}, d=109\text{mm}, b=25\text{mm}$$

Mikrotvrdost podle Vickerse byla měřena se zatížením 0,3 kg. Graf naměřených hodnot je uveden v kapitole 3.3.

Přesné chemické složení bylo stanoveno pomocí optické emisní spektroskopie.



Obr. 3.1.1 Vzorek použitý v práci [6]

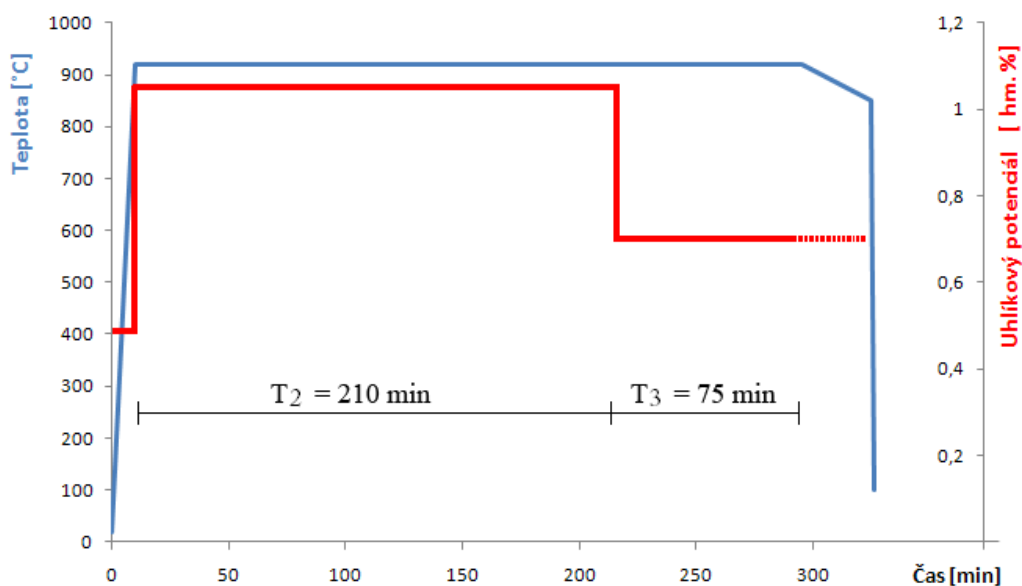
Chemické složení udávané výrobcem a stanovené pomocí chemického rozboru jsou uvedeny v tabulce 3.1.1. Tabulka neobsahuje příměsi, které jsou zanedbatelné, a nemají proto v průběhu simulace prakticky žádný význam.

	C	Si	Mn	P	S	Cr	Mo	Ni
Výrobce deklarováno	0,15		0,5		0,025	0,65	0,28	1,5
	až	$\leq 0,12$	až	$\leq 0,035$	až	až	až	až
	0,23		0,8		0,035	0,85	0,38	1,9
Změřeno	0,2	0,11	0,79	0,01	0,031	0,72	0,33	1,57

Tab. 3.1.1 Chemické složení zkoumaného materiálu [hm. %]

Chemicko-tepelné zpracování zkoumaného vzorku bylo provedeno v průběžné peci s následujícím průběhem:

- Náběh na teplotu 920° při „ochranném“ uhlíkovém potenciálu  $C_p = 0,5$
- Sycení uhlíkem při konstantní teplotě 920°, uhlíkovém potenciálu  $C_p = 1,05$  po dobu 210 minut.
- Difuzní perioda při stejné teplotě ale sníženém uhlíkovém potenciálu  $C_p = 0,75$  po dobu dalších 75 minut.
- Přichlazení před kalením.
- Kalení z teploty 850° do proudícího oleje o teplotě 60°



Obr. 3.1.2 Zjednodušený grafický průběh teplot a uhlíkového potenciálu



Vzhledem k tomu, že k samotnému zpracování byla použita průběžná pec, jež má ve směru pohybu vsázky více samostatně regulovatelných teplotních a sytících pásem, lze uvažovat, že v jednotlivých fázích zpracování dochází ke změně teploty okolí a uhlíkového potenciálu takřka okamžitě.

Při přechodu do pásma s rozdílnou teplotou se teplota na povrchu mění exponenciálně, zatímco ve středu materiálu bude průběh pozvolnější závislý hlavně na tloušťce materiálu. Změnu uhlíkového potenciálu v různých pásmech uvažujeme skokovou bez jakýchkoliv přechodů. Dále v každém pásmu uvažujeme uhlíkový potenciál konstantní bez jakýchkoliv regulačních odchylek.

**První fáze** slouží k vyrovnaní teplot v celém průřezu materiálu. Doba trvání 10 min. a nízký uhlíkový potenciál sloužící pouze k zamezení oduhličení povrchu a nemá na konečný koncentrační profil prakticky žádný vliv. V této části procesu tedy není difuze uhlíku uvažována.

Difuzi uhlíku do základního materiálu uvažujeme až od **druhé fáze**, kdy je v celém průřezu materiálu dostatečná teplota a okolní atmosféra s uhlíkovým potenciálem 1,05 vyvolává gradient aktivity, umožňující rychlé nasycení povrchu uhlíkem.

Po 210 minutách primárního syčení nastává **třetí fáze**, kdy je skokově snížen uhlíkový potenciál na hodnotu 0,75. Tato fáze slouží ke snížení koncentračního gradientu pod povrchem, následkem čehož se po zakalení snižuje vnitřní pnutí. I v této fázi však uhlík postupuje ke středu materiálu a zvyšuje hloubku nasycení.

Ve **čtvrté fázi** dochází k přichlazení materiálu před kalením. Přímé kalení s přichlazením snižuje obsah zbytkového austenitu a snižuje deformace výrobku. V této fázi předpokládáme, že volný povrch přes který probíhá difuze, bude relativně rychle ochlazen a difuze se prakticky zastaví (vliv teploty na difuzivitu je blíže objasněn v kapitole 3.2.4). Další opodstatnění tohoto předpokladu je patrný z grafu 3.2.4, kde lze pozorovat postupné ustalování profilu aktivity následkem vyrovnávání jejího gradientu. Difuzi uhlíku lze tedy zjednodušeně uvažovat pouze v oblasti konstantních teplot ve fázích 2 a 3.

Poslední pátá fáze je již samotné zakalení do proudícího oleje.

## 3.2 Rozložení uhlíku po cementaci

K získání rozložení hmotnostní koncentrace uhlíku pod povrchem nauhličeného vzorku je ve dvou navazujících fázích výpočtu použit model kvazistacionární difuze uhlíku.

První část simuluje pomocí analytického řešení modifikovaného II. Fickova zákona průběh primárního sycení.

Druhá část simuluje metodou konečných diferencí „rozdifundování“ již nasyceného uhlíku během tzv. difuzní periody. Tato část vychází z rozložení aktivity získaného pomocí analytického řešení v první fázi.

Z konečného rozložení aktivity je následně zpětně vypočítán koncentrační profil uhlíku pod povrchem materiálu.

### 3.2.1 Vstupní parametry použité při výpočtu

Vzhledem k tomu, že kvazistacionární model difuze předpokládá, že hnací silou difuze uhlíku je gradient jeho aktivity, musí první kroky výpočtu vést právě k jejímu stanovení ve výchozím materiálu.

Výpočet aktivity v základním stavu materiálu byl proveden v souladu s teoretickými předpoklady definovanými v kapitole 2.3.3, a to pro pět různých variant chemického složení uvažované oceli.

První dvě uvažované varianty vycházejí z chemického složení oceli udávané výrobcem, a určují tak rozsah aktivity uhlíku, který je možný získat pomocí různého poměru legujících prvků. Tyto varianty vycházejí z krajních možností skutečného obsahu legujících prvků a příměsí. Jejich význam tkví názorností, jak dalece ovlivňuje chemické složení oceli samotnou aktivitu uhlíku a jaký dopad na následující výpočty by v neznalosti skutečného složení měl fakt, že výrobcem udávané složení oceli je v takto širokém intervalu.

Jinak řečeno, jaké možné odchylky od skutečnosti se lze dopustit, pokud skutečné chemické složení neznáme a jsme nuceni vycházet pouze z údajů udávaných výrobcem.

**První varianta** tak udává spodní hodnotu aktivity uhlíku a je proto dána minimálním množstvím uhlíku, minimálním množstvím legur a přísadových prvků které zvyšují aktivitu a maximálním množstvím legur a přísadových prvků které aktivitu snižují.

**Druhá varianta** naopak udává horní hodnotu aktivity uhlíku, která je dána maximálním možným obsahem uhlíku, legur a přísadových prvků které aktivitu zvyšují a minimálním množstvím legur a přísadových prvků které aktivitu snižují.

**Třetí varianta** vychází ze středních hodnot chemického složení udávaného výrobcem. Tato varianta je by byla použita v případě, kdy by nebylo známo skutečné chemické složení oceli.

**Čtvrtá varianta** vychází ze skutečného chemického složení převzatého z práce [6]. Vzhledem k tomu, že konečné výsledky simulace budou porovnávány rovněž s výsledky dosaženými v této práci, bude k následujícím výpočtům použita právě tato varianta.

**Pátá varianta** je kontrolní, obsahující nulový podíl legujících prvků a sloužící ke kontrole výpočtové tabulky. Myšlenka je taková, že pokud ve všech polích s obsahem legur a příměsí předpřipravené tabulky se vzorci dosadíme nulové hodnoty, výsledná aktivita se musí číselně shodovat s hmotnostní koncentrací uhlíku zadané na vstupu.

Varianta	C	Si	Mn	P	S	Cr	Mo	Ni
Minimální	0,15	0	0,8	0	0,025	0,85	0,38	1,5
Maximální	0,23	0,12	0,5	0,035	0,035	0,65	0,28	1,9
Střední	0,19	0,06	0,65	0,0175	0,03	0,75	0,33	1,7
Skutečná	0,2	0,11	0,79	0,010	0,031	0,72	0,33	1,57
Kontrolní	0,2	0	0	0	0	0	0	0

Tab. 3.2.1 Varianty chemického složení pro výpočet aktivity

\*Prvky zvyšující aktivitu jsou označeny zeleně, snižující červeně.

### 3.2.2 Stanovení aktivity v základním materiálu

Všechny uvažované varianty složení byly počítány pomocí předem nadefinované excelové tabulky s již obsaženými vzorci pro výpočet. Tato tabulka je univerzální pro jakýkoliv obsah zvolených legur a je také velmi snadno rozšiřitelná o další chemické prvky.

Uhlíkový potenciál atmosféry je definován v hmotnostních procentech, zatímco aktivita uhlíku v oceli je podle vztahu 2.3.10 určena pomocí molárního zlomku. Výpočet proto musí být rozdělen na fázi „dopřednou“, kde se ze zadaných hmotnostních koncentrací všech složek vypočte aktivita podle definice, a následnou inverzní fázi, kde je aktivita opět přepočtena do jednotek hmotnostních. Pro zjednodušení převodu mezi molárními a hmotnostními koncentracemi je uvažován myšlený objem materiálu o hmotnosti 1kg.

Celý výpočet je blíže specifikován následovně:

- Nejprve jsou z molárních hmotností a hmotnostních koncentrací daných prvků spočítány látkové množství příslušných složek připadající na 1Kg roztoku. Podle vztahu:

$$n^i = \frac{C_m^i \cdot 10}{M_m^i} [mol]$$

kde  $C_m^i$  je hmotnostní koncentrace příslušné složky  $i$  v [hm. %],  $M_m^i$  je molární hmotnost prvku  $i$  v [g/mol]

- Pokud známe látkové množství všech složek obsažených v roztoku, lze snadno určit molární zlomky příslušných prvků  $N^i$  jako poměr látkového množství  $n^i$  příslušného prvku a součtu látkových množství všech obsažených prvků v roztoku  $\sum n^i$

$$N^i = \frac{n^i}{\sum n^i}$$

Pro kontrolu lze sečíst molární zlomky všech složek, kde musí platit  $\sum N^i = 1$

- V dalším kroku vyjádříme podle vztahu 2.3.12 interakční koeficienty všech substitučních prvků obsažených v roztoku jako:

$$\varepsilon_c^j = \left( -11 + \frac{37500}{T} \right) \cdot \ln \frac{v_c^j}{6} \cdot \exp \left( -0,684 \cdot \ln \frac{v_c^j}{6} \right)$$

kde  $T$  je teplota v [K] a  $v_c^j$  je charakteristické číslo příslušného substitučního prvku podle tabulky 2.3.2.

- Aktivní koeficient uhlíku na základě aditivnosti účinků jednotlivých substitučních prvků vyjádříme jako:

$$\gamma_c = \exp \left( \sum \varepsilon_c^j \cdot N^j \right)$$

kde se sumační znaménko vztahuje na všechny přítomné substituční prvky  $j$ .

- Lze též snadno určit aktivní koeficient uhlíku pro každý substituční prvek zvlášť a zjistit tak, jaký vliv na aktivitu uhlíku má dané látkové množství daného substitučního prvku podle výrazu:

$$\gamma_c^j = \exp(\varepsilon_c^j \cdot N^j)$$

Vliv každé přísady je snáze viditelný, odečteme-li od aktivního koeficientu 1, tedy:  $\gamma_c^j - 1$  viz graf 2.3.1

- Nyní lze již podle známého vztahu 2.3.10 vyjádřit aktivitu uhlíku v austenitu  $a_c$

$$a_c = \gamma_c \cdot N_1^c$$

Výraz  $N_1^c$  vyjadřuje molární zlomek uhlíku v původním roztoku.

V této fázi je již známa molární aktivita uhlíku. Jak již bylo výše psáno, pro potřeby dalších výpočtů je zapotřebí, aby byla aktivita vyjádřena ve formě hmotnostní koncentrace, tedy koncentrace uhlíku v ideálním roztoku.

- Uvažujme tedy objem původního roztoku, který měl na začátku hmotnost 1kg. Molární množství veškerých substitučních prvků, stejně jako železa zůstávají zachovány. Mění se pouze množství obsaženého uhlíku. Pokud má být koncentrace složek podle Raoultova zákona v rovnováze, musí platit, že  $\gamma_c=1$ . Dosadíme-li tento předpoklad do vztahu 2.3.10 zjistíme, že aktivita v nově definovaném ideálním roztoku číselně přechází v hmotnostní zlomek uhlíku  $N_2^c$ .
- Známe-li molární množství všech substitučních prvků včetně železa, stejně jako známe molární zlomek uhlíku v tomto roztoku, lze molární množství uhlíku určit podle vztahu:

$$n_c = -\frac{\sum n_i \cdot N_2^c}{N_2^c - 1}$$

Kde  $\sum n_i$  značí součet molárních množství všech substitučních prvků včetně železa.

- V této fázi jsou známy látkové množství všech přítomných složek roztoku. Pokud tato látková množství vynásobíme molárními hmotnostmi daných prvků, dostáváme hmotnosti jednotlivých složek roztoku vztahem:

$$m_i = n^i \cdot M_m^i$$

- Je zřejmé, že pokud v myšleném objemu původního roztoku zůstává zachované látkové množství železa a substitučních prvků s výjimkou množství uhlíku, musí se zákonitě změnit celková hmotnost. Tu tedy získáme prostým sečtením všech dílčích hmotností.

$$m = \sum m_i$$

- Nyní již lze vyjádřit hmotnostní zlomek jednotlivých složek roztoku jako poměr jednotlivých hmotností k hmotnosti celého roztoku. Vynásobením hmotnostního zlomku 100 dostáváme procentuální vyjádření (hmotnostní koncentraci).

$$C_m^i = \frac{m_i \cdot 100}{m} \text{ [hm. \%]}$$

Hledaná aktivita uhlíku je rovna koncentraci uhlíku v námi myšleném ideálním roztoku, tedy  $A_c = C_m^c$

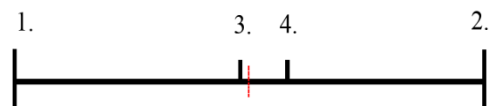
Všechny předešlé výpočty jsou pro variantu se skutečným chemickým složením nadefinovány a přehledně uspořádány v tabulce 3.2.2. Pro všechny ostatní varianty chemického složení byly použity totožné tabulky, uvedené v příloze.

Tab. 3.2.2 Výpočet aktivity uhlíku v základním materiálu pro variantu č.4

Prvek	Si	Mn	P	S	Cr	Mo	Ni	C	Fe
M <sub>m</sub> [g/mol]	28,086	54,938	30,974	32,060	51,996	95,940	58,710	12,011	55,847
C <sub>m</sub> [hm. %]	0,11	0,79	0,01	0,031	0,72	0,33	1,57	0,2	96,239
n [mol]	0,039	0,144	0,003	0,010	0,138	0,034	0,267	0,167	17,233
N	0,0022	0,0080	0,0002	0,0005	0,0077	0,0019	0,0148	0,0092	0,9555
ν <sub>c</sub>	10	5	11	12	4	4	8		
ε <sub>c</sub>	7,360	-4,220	8,182	8,816	-10,933	-10,933	4,828		
γ <sub>c</sub> <sup>i</sup>	1,016	0,967	1,001	1,005	0,919	0,979	1,074		
γ <sub>c</sub>	0,956								
N								0,00883	
n [mol]	0,039	0,144	0,003	0,010	0,138	0,034	0,267	0,159	17,233
m [g]	1,1	7,9	0,1	0,31	7,2	3,3	15,7	1,91183	962,39
C <sub>m</sub> [hm. %]	0,11	0,79	0,01	0,03	0,72	0,33	1,57	0,1912	96,25
γ <sub>c</sub> <sup>i</sup> − 1      0,016    -0,033    0,001    0,005    -0,081    -0,021    0,074									
Teplota [K]		1193		Hmotnost původního objemu materiálu [g]				999,912	
Aktivita molární		0,00883							
Aktivita		0,1912							

č.	Varianta	C [hm.%]	Aktivita
1	Minimální	0,15	0,137683
2	Maximální	0,20	0,229946
3	Střední	0,19	0,182016
4	Skutečná	0,20	0,191200
5	Kontrolní	0,2	0,2

Tab. 3.2.3 Hodnoty aktivit pro různé varianty chemického složení



Obr. 3.2.1 Grafické znázornění rozsahu aktivit pro různé varianty chem. složení

Na Obrázku 3.2.1 je tenkou čarou znázorněn střed intervalu teoretických hodnot rozložení aktivity uhlíku podle výrobcem udávaného chemického složení.



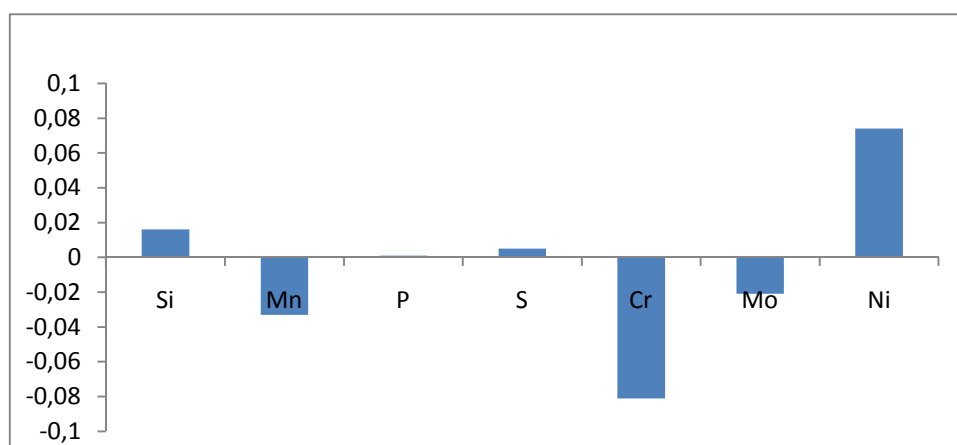
Díky převaze legur snižujících aktivitu v oceli vychází střední teoretická hodnota nížeji položená, než se nachází střed teoretického intervalu hodnot a stejně tak aktivita maximální je nižší, než by odpovídala aktivitě bez uvažování jakýchkoliv přísad.

### 3.2.3 Vliv jednotlivých přísad na aktivitu uhlíku

Pro podrobnější analýzu vlivu jednotlivých přísad byl vytvořen výňatek z tabulky 3.2.2

Prvek	Si	Mn	P	S	Cr	Mo	Ni
$C_m$ [hm. %]	0,11	0,79	0,01	0,031	0,72	0,33	1,57
N	0,0022	0,0080	0,0002	0,0005	0,0077	0,0019	0,0148
$\varepsilon_c$	7,360	-4,220	8,182	8,816	-10,933	-10,933	4,828
$\gamma_c^i - 1$	0,016	-0,033	0,001	0,005	-0,081	-0,021	0,074

Podle hodnot  $\gamma_c^i - 1$  je zřejmé, že největší vliv na aktivitu uhlíku má při daném složení díky vysokému interakčnímu koeficientu a střední koncentraci chróm. Ten je následovaný díky nejvyšší koncentraci niklem, který však ztrácí převahu díky nízkému interakčnímu koeficientu. Mangan má i přes střední koncentraci podobný vliv jako molybden o poloviční koncentraci díky nízkému interakčnímu koeficientu. Vliv křemíku je ze všech legur nejmenší. Pro úplnost výčtu je vliv fosforu a síry naprosto symbolický.



Graf 3.2.1 Grafické znázornění vlivu jednotlivých přísad na aktivitu uhlíku

### 3.2.4 Stanovení difuzivity

Veškeré výpočty, počínající stanovením difuzivity až po konečné rozložení aktivity uhlíku jsou provedeny pomocí software Mathcad 14.

Mathcad je plně symbolický grafický nástroj pracující s jednotkami SI. Jeho použití je přehledné, přičemž veškeré vztahy jsou například oproti tabulkovým procesorům jasně viditelné. Použitím jednotek ve výpočtech navíc získáváme automatickou rozměrovou kontrolu daných vztahů.

Výpočet byl provádět v souladu s teoretickou částí definovanou v kapitole 2.3.3.

Nejprve vyjádříme teplotní závislost difuze pomocí Arrheniova vztahu:

$$D_c = D_0 \cdot \exp\left(\frac{-\Delta H}{R \cdot T}\right)$$

kde dosazením hodnot:

$D_0 \left[ \frac{m^2}{s} \right]$	$R \left[ \frac{J}{mol \cdot K} \right]$	$\Delta H \left[ \frac{kJ}{mol} \right]$	$T [K]$
$4 \cdot 10^{-5}$	8,314	140	$920 + 273$

Získáme difuzivitu:

$$D_c = 2,97 \cdot 10^{-11} \left[ \frac{m^2}{s} \right]$$

Hodnoty  $D_0$  a  $\Delta H$  jsou pro uhlík v austenitu v rozsahu teplot 500°C - 1100°C uvedeny v tabulce 2.3.1.

Nyní již stačí podle vztahu 2.3.13 tuto hodnotu dělit druhou mocninou aktivního koeficientu difuze  $\gamma_c = 0,956$  a získat tak difuzní koeficient použitelný v kvazistacionárním modelu, tedy :

$$D^a = \frac{D_c}{\gamma_c^2}$$

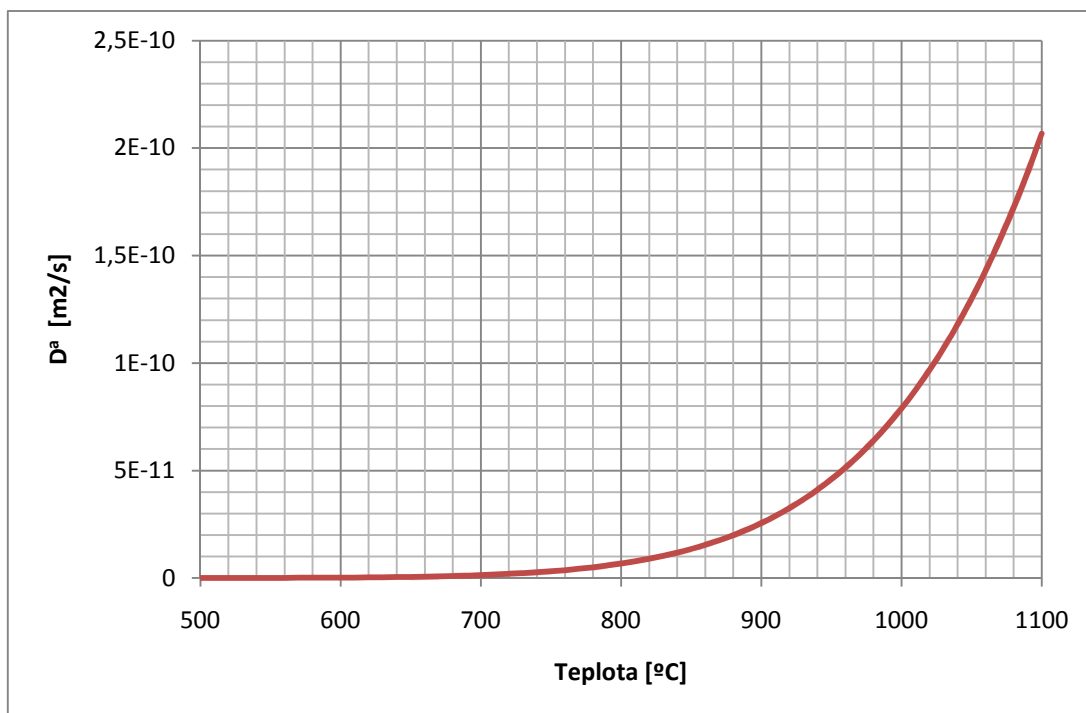
Je zřejmé, že v případě nulového podílu legujících prvků a přísad, vychází interakční koeficient  $\gamma_c = 1$ . Načež se difuzní koeficient  $D^a = D_c$  definovaného pro Fickovy difuzní zákony založené na gradientu koncentrace jako hybné síly difuze.

Pro teplotu 920°C a chemické složení varianty se skutečným obsahem všech přísad vychází difuzivita  $D^a = 3,25 \cdot 10^{-11} \left[ \frac{m^2}{s} \right]$

Pro teplotu 850°C vychází  $D^a = 1,34 \cdot 10^{-11} \left[ \frac{m^2}{s} \right]$ , tedy takřka třetinová.

Lze tedy uvažovat, že předpoklad zanedbatelného vlivu difuze v oblasti mezichlazení na konečnou koncentraci byl oprávněný.

Grafická závislost difuzivity na teplotě pro definovanou oblast teplot a chemické složení je znázorněna v grafu 3.2.2



Graf 3.2.2 Závislost difuzivity na teplotě

### 3.2.5 Profil uhlíkové aktivity během difuze

Jak již bylo uvedeno v úvodu kapitoly 3.2, profil aktivity byl stanoven ve dvou na sebe navazujících fázích. První sytící fáze vychází z analytického řešení modifikovaného druhého Fickova zákona. Druhá fáze výsledky tohoto řešení rozšiřuje o možnost změny parametrů během sytícího procesu, a to numerickým výpočtem metodou konečných diferencí.

**První fáze** výpočtu je velice prostá. Pokud uvažujeme sycený předmět za polonekonečnou desku, lze pomocí vztahu:

$$\frac{a_{c(x,t)} - a_c^2}{a_c^1 - a_c^2} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \gamma_c \cdot \sqrt{D^a \cdot t}}\right)$$

snadno vyjádřit rozložení aktivity jako funkci polohy a času ve tvaru:

$$a_{c(x,t)} = \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \gamma_c \cdot \sqrt{D^a \cdot t}}\right)\right) \cdot (a_c^1 - a_c^2) + a_c^2$$

kde:

$\gamma_c$  a  $D^a$  jsou již známé hodnoty aktivního koeficientu a difuzivity,

$a_c^1$  je okrajová podmínka, při které uvažujeme, že se na povrchu okamžitě ustaví konstantní aktivita odpovídající uhlíkovému potenciálu sytící atmosféry  $a_c^1 = c_p$ ,

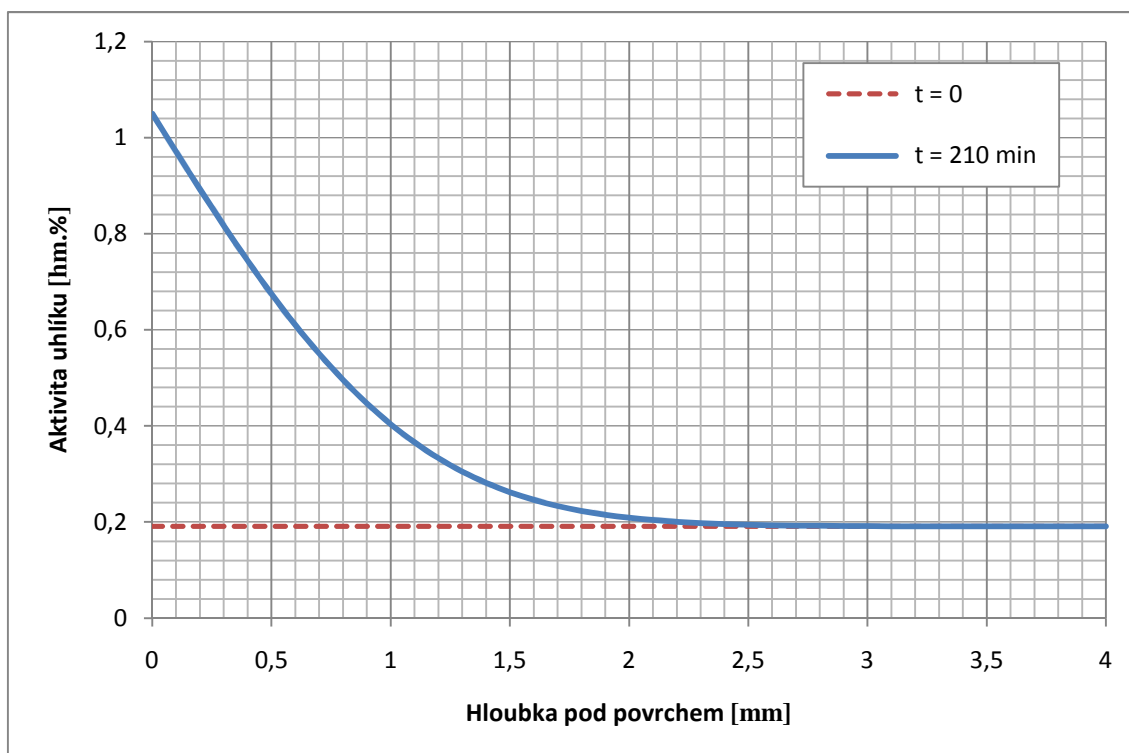
$a_c^2$  je počáteční podmínka, která vyjadřuje aktivitu odpovídající základnímu stavu materiálu, který byl již číselně vyjádřen v kapitole 3.2.2, tedy  $a_c^2 = A_c$ .

Tímto způsobem lze dosazením hodnot:

$a_c^1$ [hm. %]	$a_c^2$ [hm. %]	$\gamma_c$ [–]	$D^a$ [ $m^2/s$ ]	$t$ [min]
1,05	0,1912	0,956	$3,25 \cdot 10^{-11}$	210

určit průběh aktivity na konci sytící fáze, a to v čase  $t=210$  min.

Výpočet byl pro potřeby druhé numerické fáze proveden s hustotou kroku 0,1mm a to do hloubky 4mm pod povrchem. V této hloubce byl již průběh aktivity prakticky konstantní, odpovídající aktivitě počátečního stavu. Grafické znázornění počáteční aktivity uhlíku a její rozložení na konci první fáze je znázorněno v grafu 3.2.3. Tabulka výstupních hodnot je uvedena v příloze.



Graf 3.2.3 Rozložení aktivity před sycením a na konci 1.fáze (t=210min)

**Druhá fáze** simulující difuzní periodu při sníženém uhlíkovém potenciálu vychází z rozložení aktivity na konci první fáze, tedy v čase 210 min od započetí sycení.

Je evidentní, že díky nekonstantnímu rozložení aktivity pod povrchem syceného materiálu je v této fázi analytické řešení modifikovaného II. Fickova zákona nemožné.

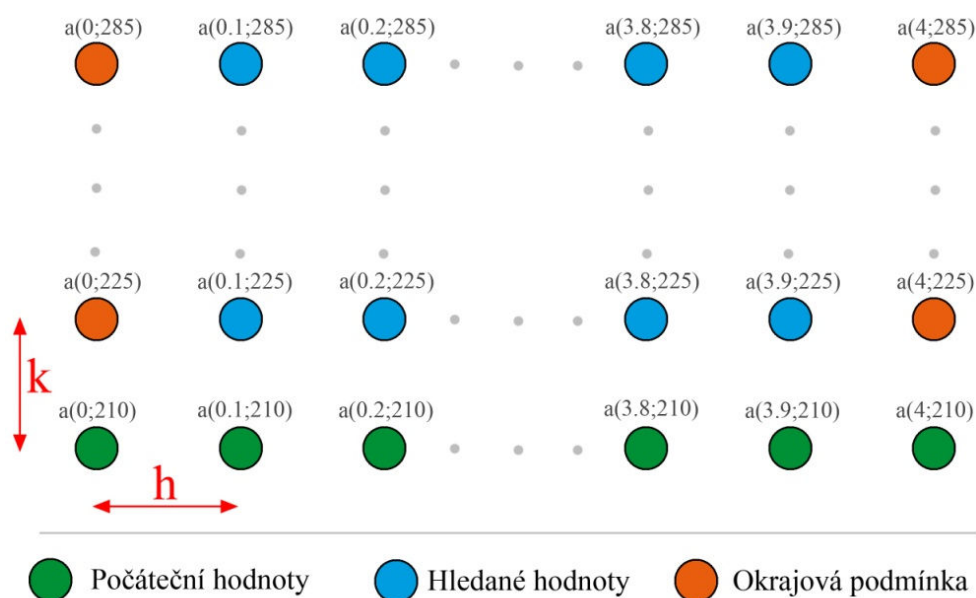
Jedinou možností je numerické řešení, například metodou konečných diferencí.

K diskretizování úlohy bylo pro potřeby experimentu zvoleno implicitní schéma definované v kapitole 2.4

Pro sestavení sítě je nutné nejprve zvolit velikost síťových kroků. Vzhledem k tomu, že použití implicitního schéma vede v každé časové vrstvě k soustavě lineárních rovnic, jejichž počet je dán počtem délkových kroků  $h$ , a jejichž výpočet byl realizován pomocí software Mathcad, je limitujícím faktorem počtu těchto kroků právě počet neznámých které Mathcad dokáže v jedné soustavě vyřešit. Uvažujeme-li, že síť bude vytvořena do hloubky 4mm, v níž je aktivita již prakticky konstantní a pokud Mathcad dovede pomocí funkce *find* řešit soustavu maximálně o 50 neznámých, je vhodné zvolit délkový krok  $h=0,1$  mm čímž dostáváme soustavu 39 rovnic o 39 neznámých. Ve výpočtu byla

volena konstantní velikost délkového kroku. Jistého zpřesnění výpočtu při zachování omezujícího počtu kroků by šlo dosáhnout použitím hustší sítě v oblastech, kde probíhá intenzivnější změna aktivity, zatímco v oblasti takřka konstantního průběhu může být krok volen mnohem hrubší. Pro zjednodušení je však volen krok konstantní.

Velikost časového kroku  $k$  není nikterak limitována, byla tedy volena pouhým odhadem na  $k=15$  minut tak, aby hodnota beze zbytku dělila 75 minut tedy délku difuzní periody. Oprávněnost takto vysokého časového kroku je posouzena v závěru kapitoly. Po určení počtu a velikosti kroků lze již sestavit samotnou síť, ze které budou tvořeny diferenční rovnice podle implicitního schéma. Síť má  $41 \times 6$  uzlových bodů z nichž  $39 \times 5$  je neznámých.



Obr. 3.2.2 Výpočetní síť s vybranými uzly

Je tedy zřejmé, že bude nutno řešit v pěti časových liniích pět soustav o 39 neznámých, kde každá časová linie obsahuje výchozí hodnoty aktivit pro výpočet aktivit v linii následující. První a poslední sloupec hodnot jsou okrajové podmínky vstupující do výpočtu.

Levá okrajová podmínka je dána hodnotou aktivity uhlíku na povrchu syceného objektu. Pokud dodržíme předpoklad o skokové změně uhlíkového potenciálu a i nadále budeme respektovat zákon o rovnosti aktivity uhlíku v atmosféře a na povrchu syceného materiálu, musíme předpokládat, že ve všech následujících časových liniích bude

aktivita uhlíku na povrchu rovna zvolenému uhlíkovému potenciálu  $a_{(0,t)}=0,75$ . Tímto důrazným předpokladem musí nutně dojít k okamžitému zpětnému oduhličení již nasyceného povrchu materiálu. V jaké míře a jak rychle k tomuto oduhličení dochází je diskutabilní. Pro jednotnost experimentálních předpokladů je však nutné, abychom i nadále tento předpoklad dodrželi.

Druhá okrajová podmínka je uvažována v hloubce 4 mm pod povrchem. Vzhledem k tomu, že v této hloubce je i po 210 minutách primárního sycení hodnota aktivity prakticky nezměněna (z hodnoty 0,1912 se zvýšila na 0,19120324), budeme uvažovat, že i v druhé 75-minutové fázi se tato hodnota výrazně nezmění. Tuto hodnotu tedy lze s jistotou nepřesností považovat za konstantní okrajovou podmínku  $a_{(4,t)}=0,19120324$ .

Nyní máme definovány obě okrajové podmínky, počáteční podmínka je dána hodnotami aktivity v čase  $t=210$  min. Lze tedy sestavit podle implicitního schéma soustavu rovnic pro následující časovou linii.

Rovnice pro první uzel v první časové linii ( $x=0,1$   $t=225$ min) vypadá následovně:

$$\frac{a(0.1; 225) - a(0.1; 210)}{k} = D \cdot \frac{a(0; 225) - 2 \cdot a(0.1; 225) + a(0.2; 225)}{h^2}$$

Tímto způsobem postupujeme až k poslednímu neznámému uzlu v bodě  $x=3,9$  :

$$\frac{a(3.9; 225) - a(3.9; 210)}{k} = D \cdot \frac{a(3.8; 225) - 2 \cdot a(3.9; 225) + a(4; 225)}{h^2}$$

Pokud takovéto rovnice vytvoříme v software Mathcad, je zbytečné přepisovat soustavu do maticového vyjádření a počítat maticovými metodami. Mnohem jednodušší je použít funkci *Find*, jenž takovou soustavu snadno vyřeší přímo ze zadaných rovnic.

Díky opakovanému tvaru rovnic by bylo možné soustavu vytvořit například pomoví některého programovacího cyklu. V tomto případě však nelze použít jednoduché funkce *Find*, která nedovoluje použití polí jako proměnných, které se v programovacích cyklech používají. Zápis každé rovnice je přitom názornější a navíc přináší možnost změny veškerých parametrů během každého časového cyklu.

Po vyřešení soustavy v první časové linii jsou výsledky nových hodnot aktivity uloženy do původních vstupních proměnných a celá série rovnic se opakuje i se stejnými okrajovými podmínkami pro další časovou linii.

Konečné hodnoty průběhu aktivity jsou dány linií hodnot v čase  $t=285$  minut, tedy na konci difuzní periody. Od tohoto okamžiku nastává snižování teploty, které se nejrychleji projeví na povrchu. S teplotou exponenciálně klesá difuzní koeficient, následkem čehož se difuze probíhající přes povrch materiálu prakticky zastaví. Je pravděpodobné, že pod povrchem bude ve velmi malém měřítku dobíhat vyrovnání koncentrace, ale tento jev již není do výpočtu zahrnut.

Pro zpětné vyjádření koncentračního profilu uhlíku pod povrchem tedy budeme vycházet z rozložení aktivity na konci difuzní periody. Průběžné hodnoty aktivity jsou uvedeny v příloze, graficky je tento časový průběh znázorněn v grafu 3.2.4. Z grafu je jasně viditelný vliv skokové změny okrajové podmínky na povrchu materiálu. Mimo to je patrné, že zhruba do hloubky 0,7 mm nastává během difuzní periody ke zpětnému oduhličení, zatímco pod touto hloubkou k vyrovnání koncentračních rozdílů.

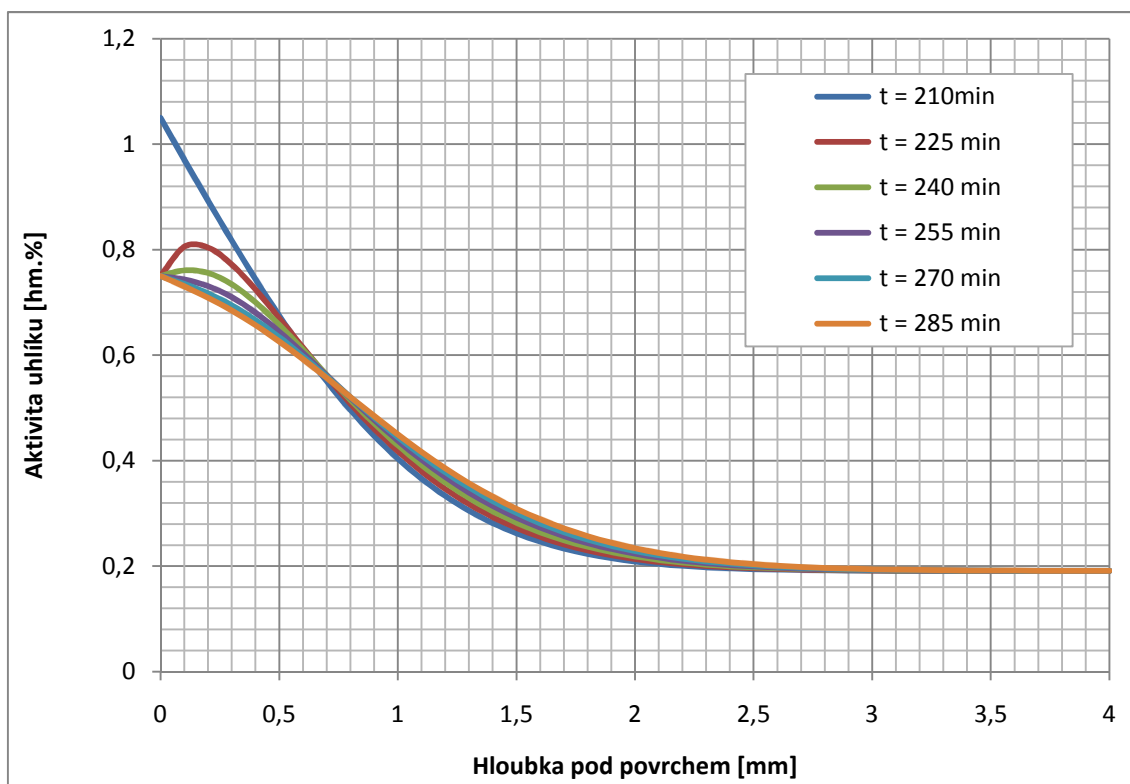
**Oprávněnost patnáctiminutového kroku** je potvrzena na jednoduchém porovnání numerického výpočtu s použitím totožných parametrů a počtem časových linií s analytickým řešením modifikovaného II. Fickova zákona.

Byla tedy vytvořena totožná síť, ve které byla počáteční aktivita rovna konstantní hodnotě v původním materiálu. Výsledný profil po pěti patnáctiminutových krocích byl porovnán s profilem, který byl spočítán pomocí analytického řešení pro čas  $t=75$  min.

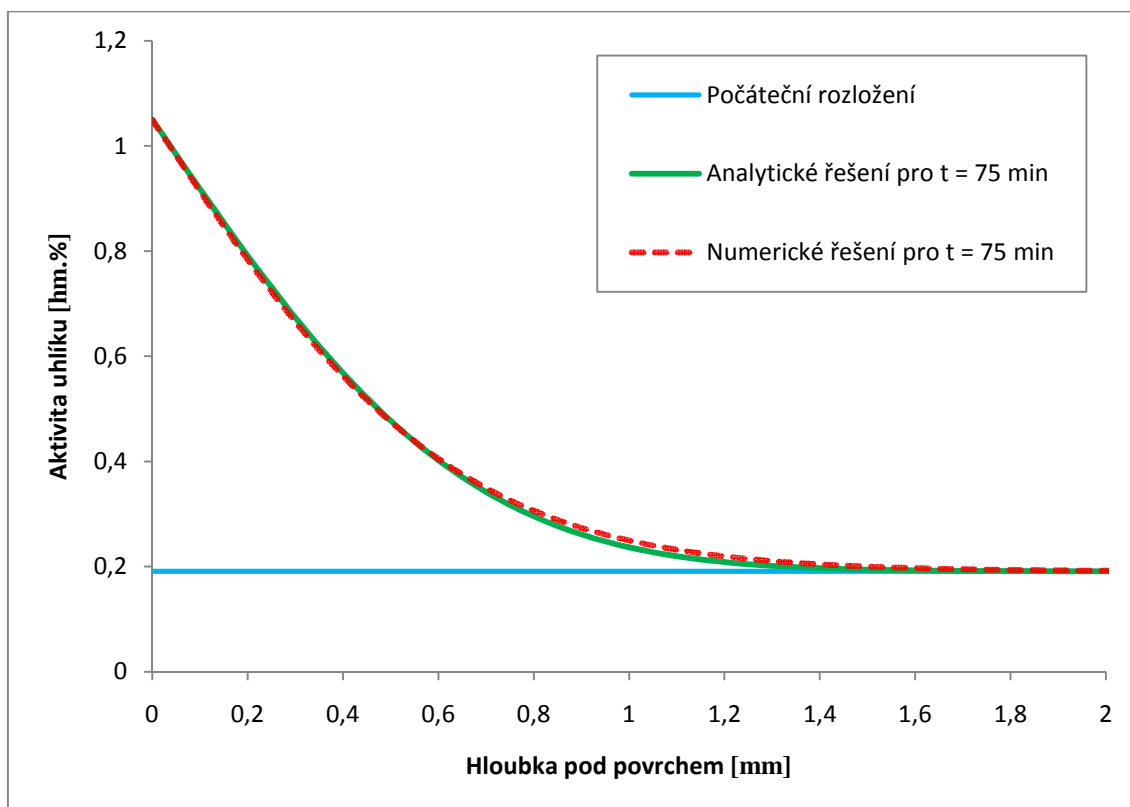
Porovnání analytického řešení s numerickým výpočtem je v grafu 3.2.5.

Vzhledem k tomu, že obě křivky jsou prakticky totožné, lze prohlásit patnáctiminutový krok za oprávněný.





Graf 3.2.4 Rozložení aktivity v průběhu difuzní periody



Graf 3.2.5 Porovnání analytického a numerického řešení

### 3.2.6 Konečný koncentrační profil uhlíku

Známe-li nyní konečné rozložení aktivity, lze na jeho základě získat rozložení koncentrace uhlíku pod povrchem.

K takovému zpětnému převodu uhlíkové aktivity na hmotnostní koncentraci je možno použít obdobnou tabulku, která byla použita k výpočtu aktivity v základním materiálu.

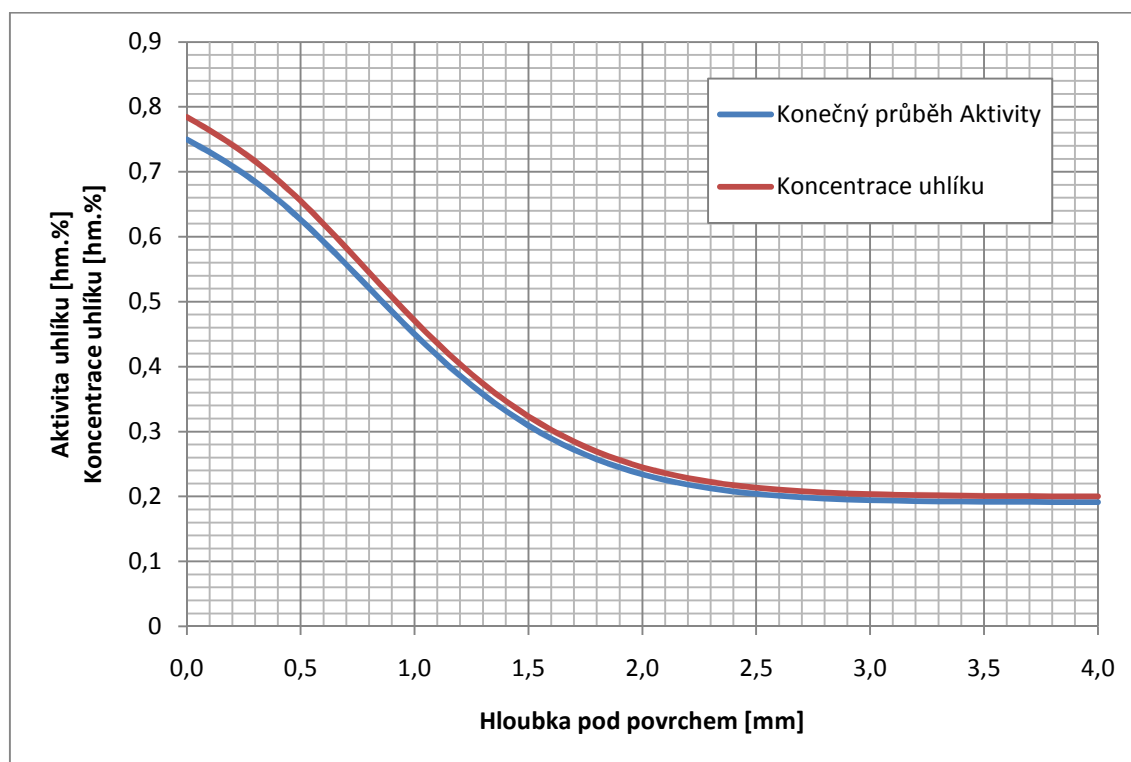
Pouze v tabulce uvažujeme obrácený smysl postupu výpočtu:

Aktivita uhlíku (Ideální roztok) → Koncentrace uhlíku (Skutečný roztok)

Z praktického hlediska stačí v druhé části tabulky upravit vztah pro hmotnostní zlomek (aktivitu) uhlíku z:

$$N_2^c = N_1^c \cdot \gamma_c \quad \text{na} \quad N_2^c = \frac{N_1^c}{\gamma_c}$$

Zpětným převodem podle takového postupu získáme rozložení koncentrace uhlíku pod povrchem, které se ustálí na konci uvažovaného cementačního procesu. Graficky jsou tyto konečné průběhy zobrazeny v grafu 3.2.6.



Graf. 3.2.6 Konečné rozložení aktivity a koncentrace uhlíku pod povrchem

### 3.3 Určení mechanických hodnot a fázového složení

I přes široké možnosti programu TTSteel, není z důvodu měnící se koncentrace uhlíku pod povrchem možné simulovat kalení nauhličené oceli přímo. Z tohoto důvodu byla celá simulace rozdělena na samostatné projekty, jež ve vrstevnicích odstupňovaných po 0,1mm reprezentují chemické složení uvažovaného vzorku. Pro každý takový projekt byly počítány samostatné ochlazovací křivky a následně i mechanické hodnoty, které odpovídají příslušné hloubce pod povrchem vzorku. Toto je hlavní myšlenka metodiky, jež rozšiřuje možnosti programu o simulaci kalení nauhličené vrstvy.

Jak již bylo v teoretické části nastíněno, ke stanovení strukturních podílů a mechanických hodnot které po zakalení nastanou je nutné, aby byly přesně definovány tři základní parametry, které tento proces ovlivňují, jsou to:

- a) Chemické složení
- b) Vlastnosti počátečního austenitu
- c) Časový průběh ochlazování

Chemické složení je dáno již definovaným koncentračním profilem uhlíku pod nauhličeným profilem a množstvím legujících prvků daných chemickou analýzou převzatou z práce [6].

Počáteční austenit je definován velikostí zrna a hodnotou zbytkové deformace. Deformace byla nulová. Velikost zrna byla bohužel neznáma, načež byla ponechána defaultní hodnota 30  $\mu\text{m}$ .

Ochlazovací křivku lze zadat buď přímo jako soustavu dvojic čas-teplota, či spočítat pomocí integrovaného ochlazovacího modulu v závislosti na definovaných ochlazovacích podmínkách.

Vzhledem k nutnosti rozdělení úlohy na samostatné projekty, jež reprezentují vrstevnice tělesa o rozdílné koncentraci uhlíku v dané hloubce pod povrchem, je nutné tento teplotní průběh počítat v každé hloubce pomocí integrovaného teplotního modulu. Tento výpočet je programem prováděn metodou konečných prvků na základě počáteční teploty, vlastnostech ochlazovacího média a velikosti a tvaru uvažovaného tělesa.

### 3.3.1 Definování parametrů chladicího média

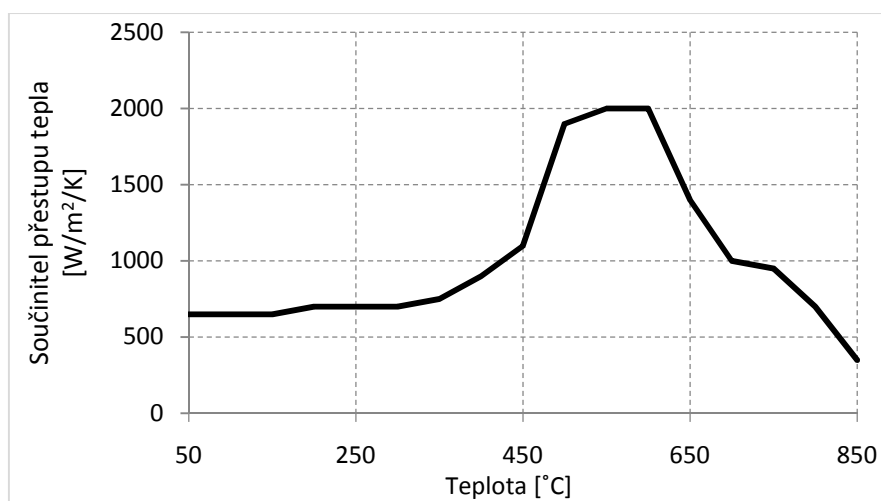
TTSteel již obsahuje sadu základních předdefinovaných chladících prostředí. Pro shodu simulace se skutečným průběhem je však vhodné, nadefinovat si pomocí závislosti součinitele přestupu tepla na teplotě médium vlastní. K tomuto účelu byla využita známá chladicí křivka, která byla v minulosti zjištěna pomocí Quench testu.

Quench test je zařízení, které sestává z přenosného počítače, pícky pro ohřev a sondy s termočlánkem. Sonda se po zahřátí v píce co nejrychleji ponoří do chladicího média, které sondu postupně různou rychlostí ochlazuje. Pomocí termočlánku uvnitř sondy lze zjistit časový průběh teplot, který je v pravidelných intervalech zaznamenáván v připojeném počítači a zhodnotit tak chladicí schopnost prakticky jakéhokoliv média.

Experiment, kterým tato křivka byla získána však nebyl standardní test, nýbrž modifikovaný v tom ohledu, že byla sonda ponořena přímo do kalící lázně s dodržáním totožných podmínek jaké byly použity v experimentu práce [6]

Známe-li tedy tuto skutečnou ochlazovací křivku, která byla pomocí sondy změřena, lze pomocí integrovaného teplotního modulu nadefinovat chladicí médium tak, aby chladicí křivka spočítaná pomocí modulu kopírovala tvar křivky skutečné.

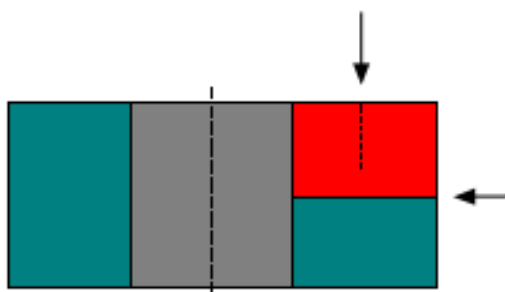
Skutečná sonda má tvar tyče o délce 40mm a průměru 12,5mm. K definování chladících schopností oleje byly tedy prováděny simulace s chlazením tyče o totožných rozměrech. Opakovaná simulace spolu se zvyšováním či snižováním součinitelů přestupu tepla pro danou sekvenci teplot byla prováděna tak dlouho, dokud obě křivky nesouhlasily. Definovaný olej byl uložen do databáze a použit ke všem následným simulacím.



Graf 3.3.1 Součinitel přestupu tepla v závislosti na teplotě pro simulační olej

### 3.3.2 Simulace ochlazování

Simulace byla rozdělena na 33 samostatných projektů. Prvních 31 projektů bylo odstupňovaných po 0,1mm od povrchu do hloubky 3mm, další dva reprezentovaly hodnoty v hloubce 3,5mm a 4mm pod povrchem. V této hloubce byly mechanické hodnoty již prakticky neměnné. V každém projektu byly ochlazovací křivky počítány ve dvou směrech měnících se hloubek pod povrchem, a to ve směru od podstavy mezikruží ke středu a od vnějšího boku ke středu viz. obrázek 3.3.1. Na obrázku je červenou barvou vyznačena symetrická část řezu tělesem, na němž simulace ochlazování probíhala.



Obr. 3.3.1 Řez simulovaným tělesem

Z důvodu velkého rozsahu koncentrace uhlíku pod povrchem, musely být projekty rozděleny do dvou skupin ocelí definovaných podle kap. 2.6.1.

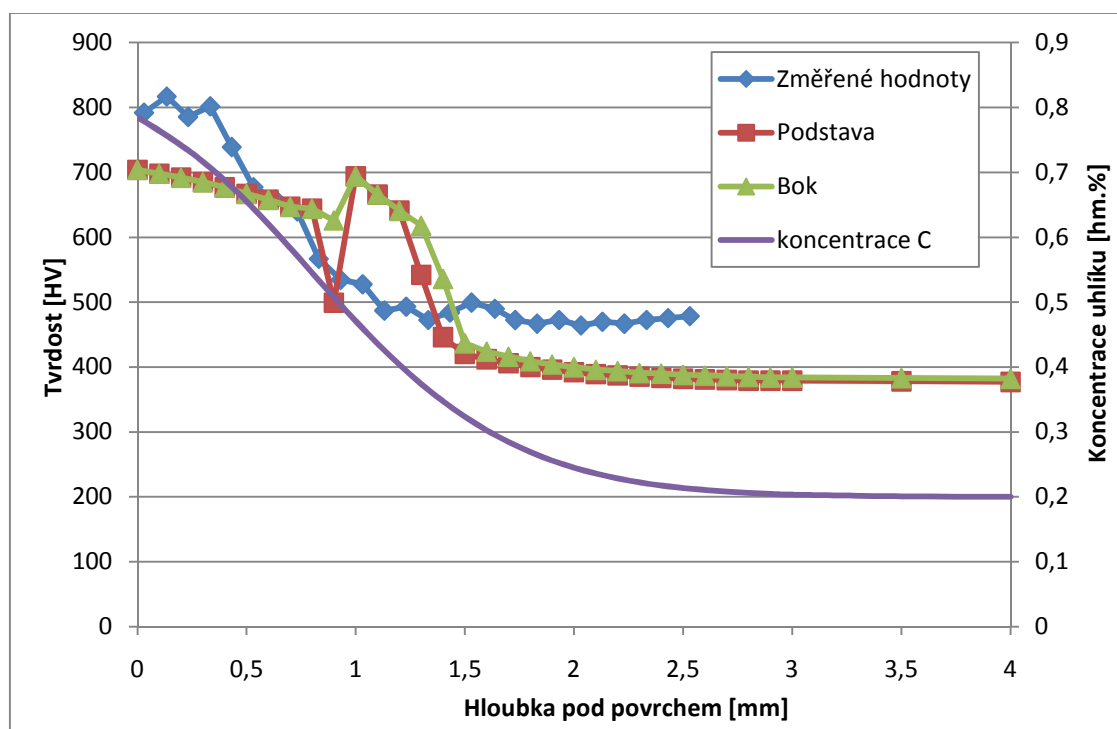
Simulační projekty reprezentující ocel od povrchové vrstvy s 0,784% C až do hloubky 0,9mm s koncentrací 0,507 % C byly definovány ve skupině nástrojových ocelí, zatímco projekty počínající hloubkou 1mm ve skupině ocelí uhlíkových a konstrukčních legovaných. Rozdělení simulace se na rozhraní uvažovaných skupin ocelí bohužel projevilo nespojitostí výsledných hodnot. Nízká důvěryhodnost regresních analýz krajních definičních oblastí je navíc snížena skutečností, že se v této oblasti nachází přechodové pásmo vysokouhlíkového a měkkého nízkouhlíkového martenzitu, které je velmi ovlivňováno podmínkami austenitizace, jenž jdou v programu vyjádřit pouze námi neznámou velikostí zrna.

Ke grafu 3.3.2 porovnávající průběh tvrdosti nasimulovaných vrstev se skutečnými hodnotami je tedy nutno přistupovat s interpretací, jež závisí na oblasti, v níž byla simulace prováděna. Simulační křivku rozdělme do tří etap, kde každá vykazuje jisté odchylky od skutečnosti v závislosti na různých vlivech.

Ve výpočtu koncentračního profilu během difuzní periody bylo uvažováno, že dochází v plném rozsahu ke zpětné difuzi. Ve skutečnosti však dochází pouze k částečnému oduhličení s redistribucí „rozléváním“ uhlíku vyrovnávající koncentraci v tenké podpovrchové vrstvě. V **první části** proto vychází díky nižšímu obsahu uhlíku simulovaná tvrdost menší, nežli byla ve skutečnosti změřena.

**Druhá přechodová část** je ovlivněna podmínkami austenitizace a přechodem mezi dvěma skupinami ocelí, kde na okrajích definičních oblastí selhávají regresní analýzy použité k výpočtům tvaru hybridního rozpadového diagramu a následně i mechanických hodnot.

Nižší tvrdost **třetí části** lze připisovat podmínkám austenitizace a ochlazování, kde se silněji začíná projevovat vliv definovaného oleje. Určení součinitele přestupu tepla je složitý problém, jenž lze způsobem, jakým byl proveden určit pouze přibližně. Pro „rychlejší“ olej lze získat tvrdost totožnou s hodnotami změřenými.



Graf 3.3.2 Porovnání změřené a simulované tvrdosti

Průběh fázového složení, meze kluzu, meze pevnosti a IRA diagramy spolu s ochlazovacími křivkami ve zvolených hloubkách jsou uvedeny v příloze.

### 3.3.3 Zhodnocení experimentu

V celkovém hodnocení experimentu je nutné si uvědomit, že cementace ocelí s následným zakalením je velice složitý proces, jehož výsledky ovlivňuje celá řada vnějších faktorů.

Pro cementaci byl uvažován zjednodušující teplotní průběh spolu s ideálně konstantním uhlíkovým potenciálem. Velký vliv na konečný profil koncentrace uhlíku měl předpoklad, při němž dochází během difuzní periody k rychlému oduhličení a to až na hodnotu danou nastaveným uhlíkovým potenciálem. Dalším vnějším faktorem je samotné ochlazování. V simulaci je proces idealizován, zatímco v praxi je chlazení ovlivňováno rozmístěním předmětů v kalícím roštu, prouděním chladicího média či směrem ponořování. Tyto vlivy jsou programem prakticky nepostižitelné.

Program TTSteel není primárně určen pro chemicko-tepelné zpracování. Nejvýraznější problém, se kterým se s jeho aplikací v procesu chemicko-tepelného zpracování lze potkat je velký rozsah koncentrace uhlíku v podpovrchové vrstvě, jenž vede k rozdělení simulace do dvou skupin ocelí.

Dalším v experimentu nepostihnutelným vlivem byly podmínky austenitizace, kde jediný parametr kterým lze tyto podmínky charakterizovat, byla neznámá velikost zrna. Velmi výrazným faktorem ovlivňujícím výpočet bylo definování ochlazovacího média. Médium bylo definováno pomocí ochlazovací křivky získané pomocí Quench testu spolu s ochlazovacím modulem programu TTSteel. Zde se například naskýtá otázka, jak dalece je souhlas simulované křivky s křivkou získanou pomocí Quench testu ovlivněn teplotními vlastnostmi Inconelové sondy a umístěním termočlánku uvnitř ní.

Dále je nutné si uvědomit, že i experimentálně zjištěná tvrdost převzatá z práce [6] s níž se simulace porovnává, byla měřena pouze jednou na jediném vzorku a je tedy zatížena neznámou chybou měření.

Uvědomíme-li si všechny tyto vlivy, které simulaci skutečného průběhu v praxi doprovází, lze konstatovat, že dosažené výsledky naplnili očekávání a při bližší specifikaci kritických parametrů simulace, by mohlo dojít k ještě výraznějšímu souhlasu se skutečnými hodnotami.

## 4. ZÁVĚR

Hlavním úkolem této diplomové práce bylo seznámení se s programem TTSteel a vypracování metodiky rozšiřující možnosti tohoto programu o simulaci procesu chemicko-tepelného zpracování.

Program TTSteel se po čas experimentu jevil uživatelsky velice přívětivý, s intuitivním ovládáním a celkově snadnou modifikovatelností pro případ simulace chemicko-tepelného zpracování. Bližší popis a funkce programu jsou uvedeny v kapitole 2.6.

K provedení simulace bylo nejprve nutné, stanovit v uvažované oceli profil koncentrace uhlíku po cementaci. Tento profil byl počítán ve dvou navazujících fázích, kde výpočet první sytící fáze byl spočítán pomocí analytického řešení modifikovaného II. Fickova zákona, na který navazoval výpočet druhé fáze za pomoci metody konečných diferencí. Metoda konečných diferencí byla mimoto porovnána s analytickým řešením, načež byly výsledky dosažené touto metodou shledány kvalitativně odpovídající analytickému řešení. Tato metoda by tak s výhodou libovolných změn difuzních parametrů během cementace mohla plně nahradit analytické řešení. Celý výpočet koncentračního profilu je proveden v kapitole 3.2.

Metodika rozšíření programu spočívala v rozdělení simulace na sérii samostatných projektů, jež po částech reprezentovali uvažované těleso s měnícím se koncentračním profilem uhlíku pod povrchem. Tato metodika byla úspěšně aplikována pro cementační ocel TL 4521 a lze ji tedy v budoucnosti využít k dalšímu upřesnění a vývoji simulace chemicko-tepelného zpracování. Podmínky simulace a porovnání dosažených výsledků s experimentálně zjištěnými hodnotami spolu s celkovým zhodnocením se nachází v kapitole 3.3.



## SEZNAM POUŽITÝCH ZDROJŮ

- [1] STRÁNSKÝ Karel. Termodynamika kvazistacionární difúze uhlíku v ocelích a její aplikace. Praha: ACADEMIA, 1977. 148 s.
- [2] PŘENOSIL Bohumil. Nitrocementace. Praha: SNTL, 1964. 232 s.
- [3] JANOVEC J., MACEK K., ZUNA P. Fyzikální metalurgie. Praha: ČVUT, 2004. 238 s.
- [4] PLUHAŘ J., PUŠKÁR A., KOUTSKÝ J., MACEK K., BENEŠ V. Fyzikální metalurgie a mezní stavy materiálu. Praha: SNTL, 1987. 420 s.
- [5] MACEK K., ZUNA P., JANOVEC J. Tepelné zpracování kovových materiálů. Praha: ČVUT, 2008. 133 s.
- [6] VILČINSKÁ L. Studium vlivů procesů tepelného zpracování na deformaci, Diplomová práce. Liberec: TUL, 2010. 58 s.
- [7] PILOUS V., STRÁNSKÝ K., Strukturní stálost návarů a svarových spojů v energetickém strojírenství. Praha: ACADEMIA, 1989. 208 s.
- [8] MÍKA S., PŘIKRYL P., Numerické metody řešení parciálních diferenciálních rovnic – Evoluční rovnice. Plzeň: ZČU, 1996. 88 s.
- [9] Program TTSteel 2.1 – Uživatelská příručka
- [10] ŠLEGER V., VRECION P., MathSoft Mathcad 7. Praha: Haar International, 1998. 150 s.
- [11] PRITCHARD PHILIP J. Mathcad - A tool for engineering problem solving. New York: McGraw-Hill, 2008. 203 s.

## SEZNAM TABULEK

Tabulka 2.3.1 : Difuzní charakteristiky vybraných prvků v austenitu

Tabulka 2.3.2 : Přiřazení charakteristických čísel  $v_c^j$  k jednotlivým prvkům

Tabulka 3.1.1 : Chemické složení zkoumaného materiálu

Tabulka 3.2.1 : Varianty chemického složení pro výpočet aktivity

Tabulka 3.2.2 : Výpočet aktivity uhlíku v základním materiálu pro variantu č.4

Tabulka 3.2.3 : Hodnoty aktivit pro různé varianty chemického složení

## SEZNAM OBRÁZKŮ

- Obrázek 2.2.1 : Mechanizmy difuze v krystalických materiálech
- Obrázek 2.2.2 : Závislost volné entalpie na poloze v k. mřížce a vliv hybné síly
- Obrázek 2.2.3 : Vektory možných přeskoků v k.p.s mřížce
- Obrázek 2.3.1 : Koncentrační profil při difuzi mezi dvěma poloprostory
- Obrázek 2.3.2 : Koncentrační profil pro difuzi do polonekonečného prostředí
- Obrázek 2.4.1 : Neumannův diagram
- Obrázek 2.5.1 : Implicitní schéma
- Obrázek 2.6.1 : Definování způsobu ochlazování
- Obrázek 2.6.2 : Ukázka výsledků simulace v barevných mapách
- Obrázek 3.1.1 : Vzorek použitý v práci [6]
- Obrázek 3.1.2 : Zjednodušený grafický průběh teplot a uhlíkového potenciálu
- Obrázek 3.2.1 : Grafické znázornění rozsahu aktivit pro různé varianty chem. složení
- Obrázek 3.2.2 : Výpočetní síť s vybranými uzly
- Obrázek 3.3.1 : Řez simulovaným tělesem

## SEZNAM GRAFŮ

Graf 3.2.1 : Grafické znázornění vlivu jednotlivých přísad na aktivitu uhlíku

Graf 3.2.2 : Závislost difuzivity na teplotě

Graf 3.2.3 : Rozložení aktivity před sycením a na konci 1. fáze ( $t=210\text{min}$ )

Graf 3.2.4 : Rozložení aktivity v průběhu difuzní periody

Graf 3.2.5 : Porovnání analytického a numerického řešení

Graf 3.2.6 : Konečné rozložení aktivity a koncentrace uhlíku pod povrchem

Graf 3.3.1 : Součinitel přestupu tepla v závislosti na teplotě pro simulační olej

Graf 3.3.2 : Porovnání změřené a simulované tvrdosti

# SEZNAM PŘÍLOH

Příloha 1. : Výpočet aktivity v základním materiálu pro variantu č. 1 - Minimální

Příloha 2. : Výpočet aktivity v základním materiálu pro variantu č. 2 - Maximální

Příloha 3. : Výpočet aktivity v základním materiálu pro variantu č. 3 - Střední

Příloha 4. : Výpočet aktivity v základním materiálu pro variantu č. 5 – Kontrolní

Příloha 5. : Průběh aktivity během cementace

Příloha 6. : ARA diagramy s ochl. křivkami ve vybraných hloubkách pod povrchem

Příloha 7. : Mechanické hodnoty a fázové složení zakalené oceli

## Příloha 1

### Výpočet aktivity uhlíku v základním materiálu pro variantu č. 1 – Minimální aktivita

[illegible]

## Příloha 2

### Výpočet aktivity uhlíku v základním materiálu pro variantu č. 2 – Maximální aktivita

[illegible]

### Příloha 3

Výpočet aktivity uhlíku v základním materiálu pro variantu č. 3 – Střední aktivita

Prvek	Si	Mn	P	S	Cr	Mo	Ni	C	Fe
M <sub>m</sub> [g/mol]	28,086	54,938	30,974	32,060	51,996	95,940	58,710	12,011	55,847
C <sub>m</sub> [hm. %]	0,06	0,65	0,0175	0,03	0,75	0,33	1,7	1,9	96,272
n [mol]	0,021	0,118	0,006	0,009	0,144	0,034	0,290	0,158	17,239
N	0,001	0,007	0,0003	0,001	0,008	0,002	0,016	0,009	0,957
ν <sub>c</sub>	10	5	11	12	4	4	8		
ε <sub>c</sub>	7,360	-4,220	8,182	8,816	-10,93	-10,933	4,828		
γ <sub>c</sub> <sup>i</sup>	1,009	0,973	1,003	1,005	0,916	0,979	1,081		
γ <sub>c</sub>	0,9583								
N								0,0084	
n [mol]	0,021	0,118	0,006	0,009	0,144	0,034	0,290	0,152	17,239
m [g]	0,6	6,5	0,175	0,3	7,5	3,3	17	1,8202	962,72 5
C <sub>m</sub> [hm. %]	0,06	0,65	0,002	0,03	0,75	0,33	1,7	0,18	96,28
γ <sub>c</sub> <sup>i</sup> – 1      0,009    -0,027    0,003    0,005    -0,084    -0,021    0,081									
Teplota [K]		1193		Hmotnost původního objemu materiálu [g]				999,92	
Aktivita molární		0,0084							
Aktivita		0,1820							



## Příloha 4

### Výpočet aktivity uhlíku v základním materiálu pro variantu č. 5 – Kontrolní výpočet

[illegible]

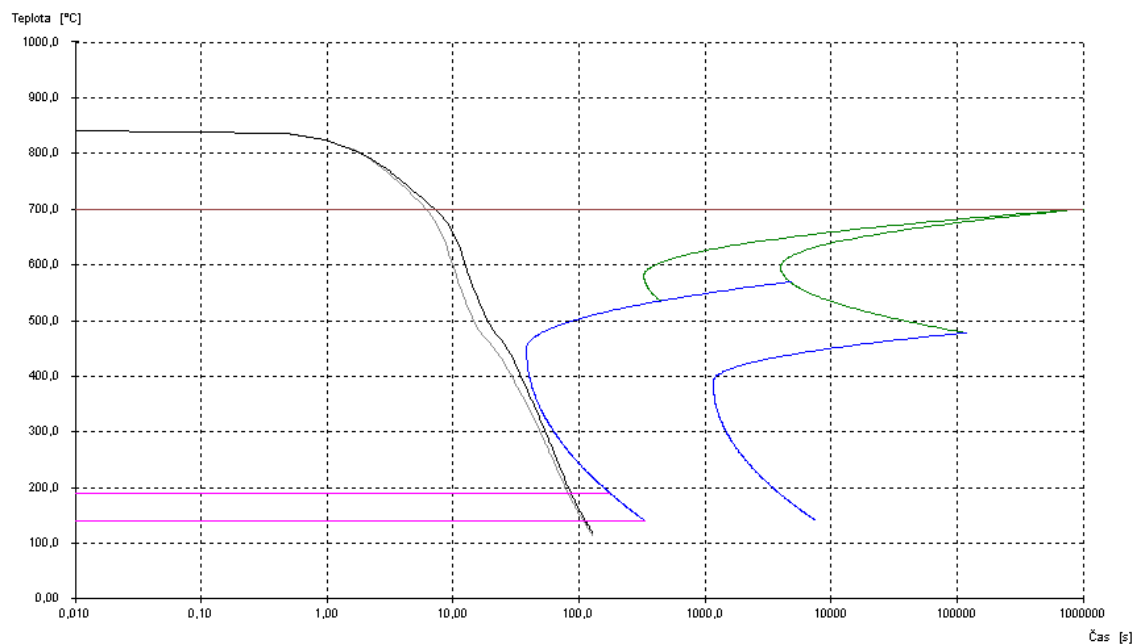
## Příloha 5

## Průběh aktivity během cementace

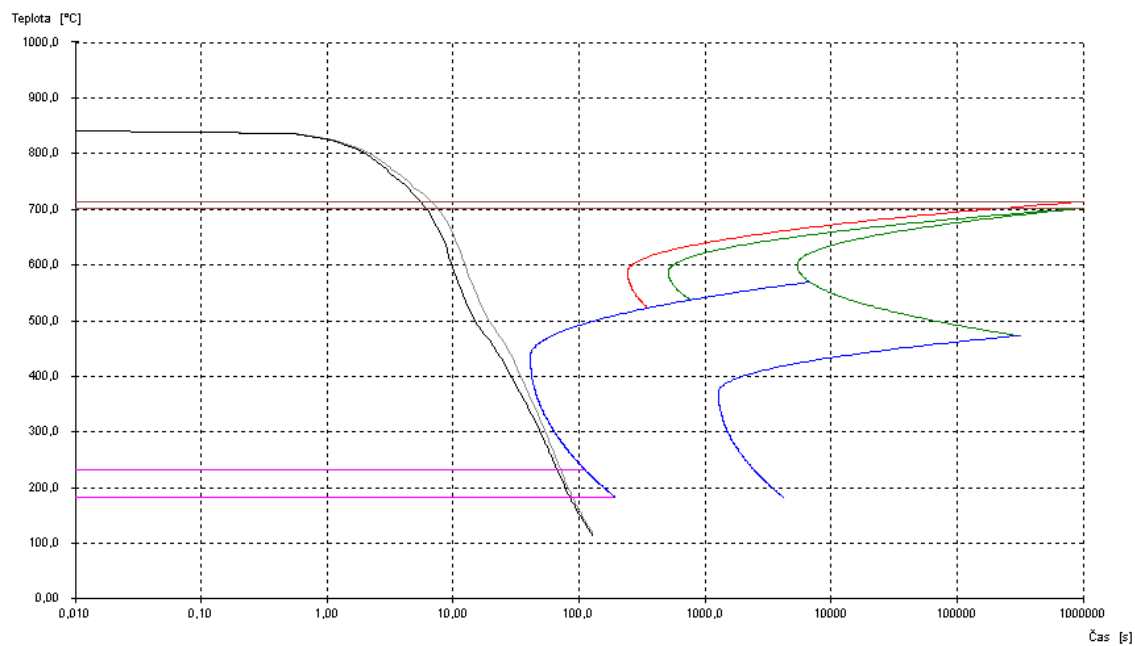
X [mm]	Čas[min]						
	Sycení		Difuzní perioda				
	0	210	225	240	255	270	285
0	0,1912	1,05	0,75	0,75	0,75	0,75	0,75
0,1	0,1912	0,970975	0,805211	0,760428	0,743326	0,734963	0,730222
0,2	0,1912	0,892997	0,80375	0,755545	0,730804	0,717067	0,708823
0,3	0,1912	0,817073	0,771777	0,734182	0,709825	0,694474	0,684605
0,4	0,1912	0,744129	0,724318	0,699966	0,680518	0,666634	0,657014
0,5	0,1912	0,674976	0,670086	0,657424	0,644562	0,634046	0,626133
0,6	0,1912	0,610287	0,614183	0,610554	0,604209	0,597864	0,592547
0,7	0,1912	0,550575	0,559611	0,562444	0,561687	0,559512	0,557144
0,8	0,1912	0,496189	0,508129	0,515302	0,518905	0,520416	0,520931
0,9	0,1912	0,44731	0,460729	0,470612	0,477356	0,481837	0,484894
1	0,1912	0,403963	0,417916	0,429301	0,438112	0,44479	0,449903
1,1	0,1912	0,36603	0,379874	0,391883	0,40188	0,410027	0,416659
1,2	0,1912	0,333277	0,346564	0,35857	0,369065	0,378049	0,385682
1,3	0,1912	0,305371	0,317797	0,329363	0,339839	0,349142	0,357315
1,4	0,1912	0,281909	0,293279	0,304108	0,314195	0,323416	0,331743
1,5	0,1912	0,262445	0,272648	0,282557	0,291999	0,300842	0,309017
1,6	0,1912	0,246512	0,255505	0,264393	0,273031	0,281291	0,289087
1,7	0,1912	0,233643	0,241436	0,249268	0,257016	0,264564	0,271822
1,8	0,1912	0,223386	0,230031	0,23682	0,243649	0,250418	0,257038
1,9	0,1912	0,215319	0,220898	0,226693	0,232618	0,238586	0,244517
2	0,1912	0,209058	0,213673	0,218548	0,223612	0,228795	0,234024
2,1	0,1912	0,204265	0,208026	0,212069	0,216338	0,220775	0,225319
2,2	0,1912	0,200642	0,203664	0,206972	0,210524	0,214272	0,218168
2,3	0,1912	0,197942	0,200335	0,203007	0,205924	0,20905	0,212349
2,4	0,1912	0,195955	0,197825	0,199954	0,202321	0,204898	0,207657
2,5	0,1912	0,194512	0,195954	0,19763	0,199527	0,201627	0,203908
2,6	0,1912	0,193479	0,194575	0,195878	0,197381	0,199073	0,200939
2,7	0,1912	0,192749	0,193572	0,194572	0,19575	0,197098	0,198608
2,8	0,1912	0,19224	0,192849	0,193609	0,194521	0,195584	0,196794
2,9	0,1912	0,191889	0,192335	0,192905	0,193604	0,194433	0,195393
3	0,1912	0,191651	0,191973	0,192396	0,192926	0,193567	0,19432
3,1	0,1912	0,191492	0,191721	0,192031	0,192429	0,192919	0,193504
3,2	0,1912	0,191386	0,191548	0,191773	0,192068	0,192438	0,192889
3,3	0,1912	0,191317	0,19143	0,191591	0,191807	0,192085	0,192428
3,4	0,1912	0,191273	0,19135	0,191464	0,191621	0,191826	0,192083
3,5	0,1912	0,191245	0,191297	0,191377	0,191489	0,191637	0,191827
3,6	0,1912	0,191227	0,191262	0,191316	0,191394	0,1915	0,191636
3,7	0,1912	0,191216	0,191239	0,191274	0,191326	0,191398	0,191491
3,8	0,1912	0,19121	0,191223	0,191245	0,191276	0,19132	0,191379
3,9	0,1912	0,191206	0,191212	0,191222	0,191237	0,191258	0,191286
4	0,1912	0,191203	0,191203	0,191203	0,191203	0,191203	0,191203

## Příloha 6 1/2

ARA diagramy s ochlazovacími křivkami ve vybraných hloubkách pod povrchem



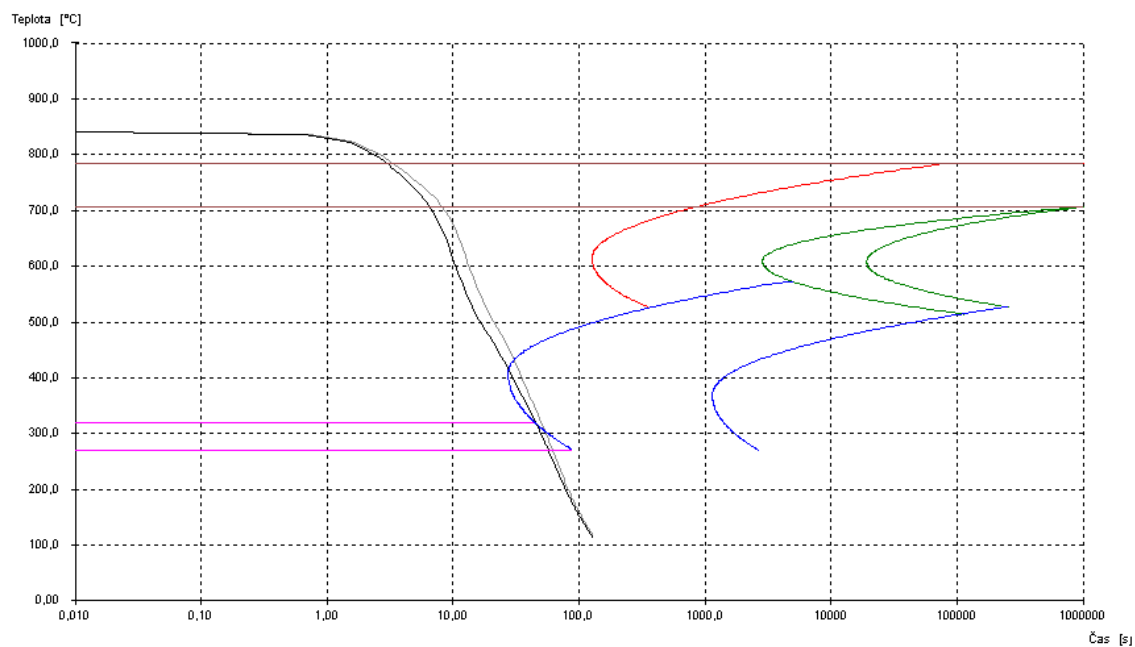
Hloubka x=0mm



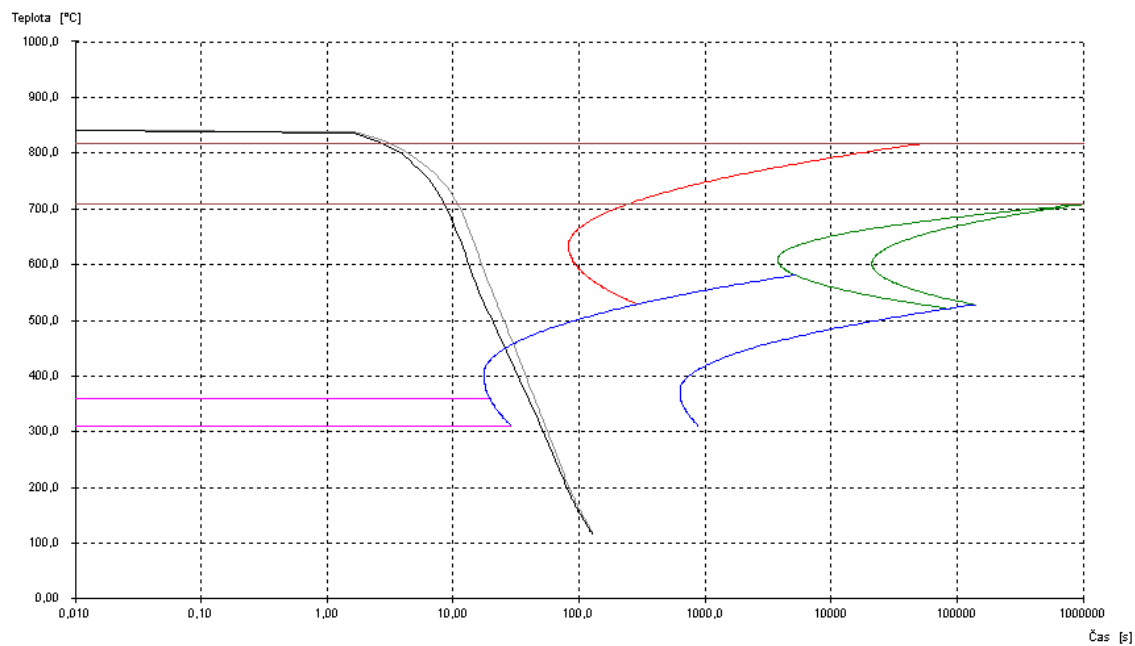
Hloubka x=0,7mm

## Příloha 6 2/2

ARA diagramy s ochlazovacími křivkami ve vybraných hloubkách pod povrchem



Hloubka x=1,5mm



Hloubka x=4mm

## Příloha 7 Mechanické hodnoty a fázové složení zakalené oceli

X [mm]	Obsah C [%]	Podstava					Bok				
		Bainit [%]	Martenzit [%]	HV	Re [MPa]	Rm [MPa]	Bainit [%]	Martenzit [%]	HV	Re [MPa]	Rm [MPa]
0	0,78454	0	100	704	2010	2333	0	100	704	2010	2333
0,1	0,76386	0	100	698	1991	2313	0	100	698	1991	2313
0,2	0,74147	0	100	692	1971	2292	0	100	692	1971	2292
0,3	0,71614	0	100	685	1949	2268	0	100	685	1949	2268
0,4	0,68727	0	100	677	1923	2240	0	100	677	1923	2240
0,5	0,65497	0	100	667	1894	2209	0	100	667	1894	2209
0,6	0,61984	0	100	658	1863	2176	0	100	658	1863	2176
0,7	0,58280	0	100	647	1830	2140	0	100	647	1830	2140
0,8	0,54492	0	100	644	1818	2128	0	100	644	1818	2128
0,9	0,50722	67,9	32,1	499	1356	1633	16,8	83,2	626	1762	2068
1	0,47062	0	100	694	1979	2300	0	100	694	1979	2300
1,1	0,43584	0	100	666	1891	2206	0	100	666	1891	2206
1,2	0,40344	0	100	641	1811	2120	0	100	641	1811	2120
1,3	0,37377	27,8	72,2	542	1493	1780	0	100	618	1735	2039
1,4	0,34702	58,4	41,6	446	1185	1450	23,6	76,4	536	1474	1760
1,5	0,32325	63,9	36,1	420	1103	1363	57,3	42,7	437	1156	1419
1,6	0,30240	63,2	36,8	412	1078	1336	58,1	41,9	424	1116	1377
1,7	0,28434	62,2	37,8	406	1057	1314	57,9	42,1	416	1089	1348
1,8	0,26887	61,3	38,7	400	1040	1295	57,4	42,6	409	1068	1325
1,9	0,25578	60,4	39,6	396	1026	1280	56,7	43,3	404	1051	1307
2	0,24480	59,6	40,4	392	1014	1268	56,1	43,9	400	1038	1293
2,1	0,23569	58,9	41,1	389	1005	1258	55,5	44,5	396	1027	1281
2,2	0,22821	58,3	41,7	387	997	1250	55	45	394	1018	1272
2,3	0,22212	57,8	42,2	385	991	1243	54,6	45,4	391	1011	1264
2,4	0,21722	57,4	42,6	383	986	1237	54,3	45,7	390	1005	1258
2,5	0,21330	57,1	42,9	382	981	1232	54	46	388	1000	1253
2,6	0,21019	56,8	43,2	381	978	1229	53,8	46,2	387	997	1249
2,7	0,20775	56,6	43,4	380	975	1225	53,6	46,4	386	993	1245
2,8	0,20585	56,4	43,6	379	972	1223	53,5	46,5	385	990	1242
2,9	0,20439	56,4	43,6	379	971	1222	53,4	46,6	384	989	1240
3	0,20327	56,3	43,7	379	970	1220	53,4	46,6	384	987	1239
3,5	0,20066	56,2	43,8	378	967	1217	53,5	46,5	383	983	1234
4	0,20001	56,3	43,7	377	965	1215	53,8	46,2	382	980	1231